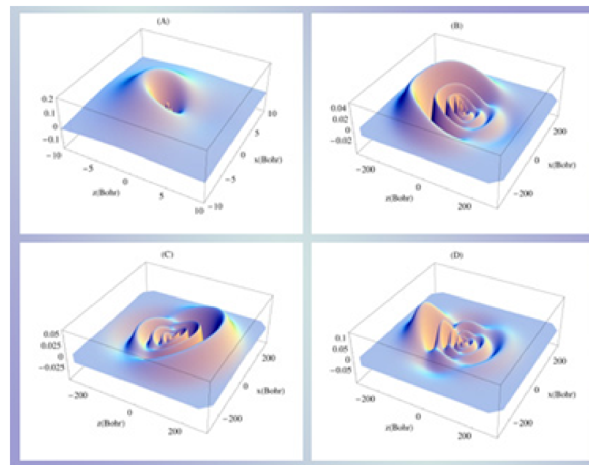
Lê Đình-Trần Công Phong

GIÁO TRÌNH

CƠ HỌC LƯỢNG TỬ



TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM HUẾ
Huế, tháng 8 năm 2011

Lời nói đầu

Cơ học lượng tử là bộ môn mở đầu của vật lý lượng tử. Đối tượng nghiên cứu của nó rất rộng rãi, từ những hạt sơ cấp đơn giản như electron, proton...đến những hệ vi mô phức tạp như nguyên tử, phân tử. Phạm vi nghiên cứu của cơ học lượng tử còn mở rộng hơn khi tính đến hiệu ứng tương đối tính của các hạt chuyển động với vận tốc lớn. Như vậy, việc nghiên cứu cơ học lượng tử là không thể thiếu được đối với những ai nghiên cứu về vật lý mà nói riêng là sinh viên ngành vật lý. Theo các tài liệu hiện hành, hiện nay đang có nhiều cách khác nhau trong việc trình bày nội dung của cơ học lượng tử. Vấn đề này tùy thuộc vào ý đồ của từng tác giả. Mỗi cách có một ưu, nhược điểm riêng và phụ thuộc vào các kiến thức toán học hỗ trợ tương ứng. Giáo trình này được tổ chức thành 09 chương, bao gồm:

-Chương 1 và chương 2 trình bày các cơ sở vật lý và toán học dẫn đến việc hình thành và xây dựng môn cơ học lượng tử. Các tiên đề cơ bản của cơ học lượng tử được trình bày ở chương 3. Phương trình cơ bản của cơ học lượng tử (phương trình Schrodinger) được đưa vào ở chương 4, trong đó khảo sát cả phần phụ thuộc thời gian và cả phần không phụ thuộc thời gian. Một số bài toán đơn giản có tính kinh điển của cơ học lượng tử cũng được khảo sát chi tiết ở chương này. Chương 5 khảo sát sự biến thiên của các đại lượng động lực theo thời gian, từ đó phân tích sự liên quan giữa tính đối xứng của không-thời gian và các định luật bảo toàn.

- Chương 6 trình bày việc ứng dụng cơ học lượng tử để giải quyết bài toán chuyển động trong trường xuyên tâm, trong đó khảo sát chi tiết năng lượng là hàm sóng của electron trong nguyên tử Hydro. Chương 7 trình bày khái niệm biểu diễn để làm cơ sở cho chương 8 đề cập đến

khái niệm spin và hệ hạt đồng nhất và nguyên lý loại trừ Pauli. Chương 9 trình bày đại cương về lý thuyết nhiễu loạn để làm cơ sở cho các phép tính gần đúng sau này.

Để thuận tiện cho sinh viên trong học tập, cuối mỗi chương là các bài tập áp dụng với các hướng dẫn ngắn gọn về cách giải.

Giáo trình này được biên soạn chủ yếu dựa trên bài giảng của các tác giả qua nhiều năm giảng dạy bộ môn này và có tham khảo nhiều tài liệu có liên quan ở trong và ngoài nước. Trong quá trình biên soạn chúng tôi cố gắng trình bày các chương mục một cách ngắn gọn và dễ hiểu, chỉ sử dụng các công cụ toán học cần thiết để giảm biết khó khăn cho sinh viên, đồng thời để nêu bật được các khái niệm vật lý. Tác giả rất mong sự góp ý xây dựng để tập tài liệu này ngày càng hoàn thiện hơn.

Huế, tháng 8 năm 2011

Nhóm tác giả

Mục lục

Chương 1

Cơ sở vật lý của cơ học lượng tử

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là trình bày quá trình hình thành và phát triển của cơ học lượng tử, trong đó lưỡng tính sóng -hạt của vật chất và giả thuyết De Broglie về tính chất sóng của hạt vật chất được khảo sát một cách chi tiết làm cơ sở cho các nghiên cứu tính chất thống kê của cơ học lượng tử.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ hiểu được sự hình thành cơ học lượng tử về mặt lịch sử cùng các nội dung cơ bản của nó, sinh viên cũng sẽ nắm được khái niệm hàm sóng của hạt vi mô và tính chất cơ bản của hàm sóng, đồng thời giải được một số bài toán liên quan đến việc chuẩn hoá hàm sóng, xác suất tìm hạt chuyển động trong một không gian đã cho.

§ 1 CÁC ĐẶC ĐIỂM CỦA VẬT LÝ HỌC CỔ ĐIỂN

Cuối thế kỷ 19 vật lý học được xây dựng hầu như hoàn thiện và thường được gọi là vật lý học cổ điển, bao gồm ba ngành chủ yếu, đó là cơ học cổ điển, thuyết điện từ và nhiệt động lực học. Trong vật lý học cổ điển, người ta phân biệt hai dạng vật chất chủ yếu, đó là hạt và sóng. Vật lý học cổ điển cho rằng hạt được đặc trưng bởi năng lượng E và xung lượng $\vec{p}$, trong lúc đó sóng được đặc trưng bởi biên độ và vectơ sóng $\vec{k}$ ($|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$) chỉ hướng truyền của sóng.

Hạt và sóng biểu hiện các tính chất hoàn toàn khác nhau, loại trừ lẫn nhau. Dựa vào tính chất của hạt và sóng mà vật lý học cổ điển có bốn đặc điểm sau đây.

(1) Tính đối lập giữa hạt và sóng

◇ Hạt là một dạng vật chất có các tính chất chủ yếu sau:

+ Hạt có vị trí xác định trong không gian tại mọi thời điểm;

+ Hạt có biên giới xác định, làm hạt tách biệt với các đối tượng vật chất khác;

+ Hạt có quỹ đạo xác định khi chuyển động.

Trong một hệ hạt, mỗi hạt giữ được tính cá thể của mình, nghĩa là chúng ta có thể theo dõi chuyển động của từng hạt riêng rẽ, ngay cả trong trường hợp hệ gồm những hạt đồng nhất như nhau. Đặc trưng chủ yếu của hạt là gây ra hiện tượng va chạm.

◇ Sóng là một dạng vật chất, đó là sự kích thích vật chất, lan truyền trong không gian và mang năng lượng. Nói một cách khác, sóng là sự truyền dao động trong không gian và theo thời gian. Đặc trưng cơ bản của sóng là gây ra hiện tượng giao thoa và nhiễu xạ.

Sóng thường gặp nhất là sóng đàn hồi, đó là sự lan truyền dao động cơ học trong môi trường đàn hồi. Sóng điện từ là sự lan truyền của dao động điện từ trong không gian (kể cả trong chân không).

Dựa vào dạng của mặt sóng người ta phân biệt sóng phẳng và sóng cầu. Tuỳ theo quan hệ giữa phương dao dộng và phương truyền sóng người ta phân biệt sóng dọc và sóng ngang. Sóng có đặc tính tuần hoàn theo thời gian (đặc trưng bởi chu kỳ T) và không gian (đặc trưng bởi bước sóng λ).

Trong vật lý học cổ điển người ta quan niệm hạt và sóng là loại trừ lẫn nhau. Vì hạt có quỹ đạo xác định nên chuyển động của hạt không thể dẫn đến những hiện tượng đặc trưng cho sóng như giao thoa, nhiễu xạ...Ngược lại, sóng không thể có những hiện tượng đặc trưng cho hạt như va chạm.

(2) Tính tất định của các quy luật

Theo vật lý học cổ điển, các tính chất của hạt (hoặc hệ hạt) đều có thể xác định được một cách chính xác. Điều này có nghĩa là cho chính xác vị trí và xung lượng của hạt tại thời điểm ban đầu, đồng thời nếu biết được các lực tác dụng lên toàn hệ và lực tác dụng lên từng hạt trong hệ thì có thể hoàn toàn xác định được trạng thái của hệ tại những thời điểm sau nhờ các phương trình cơ bản của cơ học cổ điển (phương trình Newton, các phương trình Lagrange hoặc phương trình Hamilton...).

Như vậy, tất cả các đại lượng động lực trong vật lý học cổ điển đều có giá trị hoàn toàn xác định tại mọi thời điểm, hay nói cách khác *phép đo trong vật lý cổ điển là chính xác*. Chính vì lý do đó mà các nhà triết học gọi vật lý học cổ điển là có tính tất định (determinism). Đây là một khái niệm triết học thống trị trong khoa học cho đến khi có sự ra đời của cơ học lượng tử. Nếu vũ trụ là tất định thì bất kỳ một hệ quả nào cũng phải có nguyên nhân. Vì vậy tất cả các hiện tượng đều có thể tiên đoán được và giải thích được một cách chính xác bởi các quy luật vật lý.

(3) Tính liên tục của các đại lượng động lực

Theo vật lý học cổ điển, các quá trình vật lý chỉ có thể diễn ra một cách liên tục. Khi các điều kiện đầu và trường ngoài thay đổi thì các đại lượng vật lý đặc trưng cho hệ thay đổi một cách liên tục.

(4) Phép đo không làm nhiễu loạn trạng thái

Trong vật lý học cổ điển phép đo thực hiện trên các đối tượng vĩ mô không làm thay đổi trạng thái của hệ đang đo, người ta nói rằng phép đo không làm nhiễu loạn trạng thái của hệ.

Vật lý học cổ điển thống trị một cách lâu dài và chắc chắn trong khoa học và tỏ ra rất hoàn chỉnh trong việc giải thích các hiện tượng tự nhiên. Tuy nhiên, đến cuối thế kỷ 19-đầu thế kỷ 20 với sự ra đời của thuyết tương đối trong nghiên cứu các hạt chuyển động với vận tốc lớn và yêu cầu nghiên cứu các hạt

bên trong nguyên tử và hạt nhân, người ta phát hiện ra rằng vật lý học cổ điển không thể giải thích được các tính chất của nguyên tử và phân tử và sự tương tác của chúng với bức xạ điện từ.

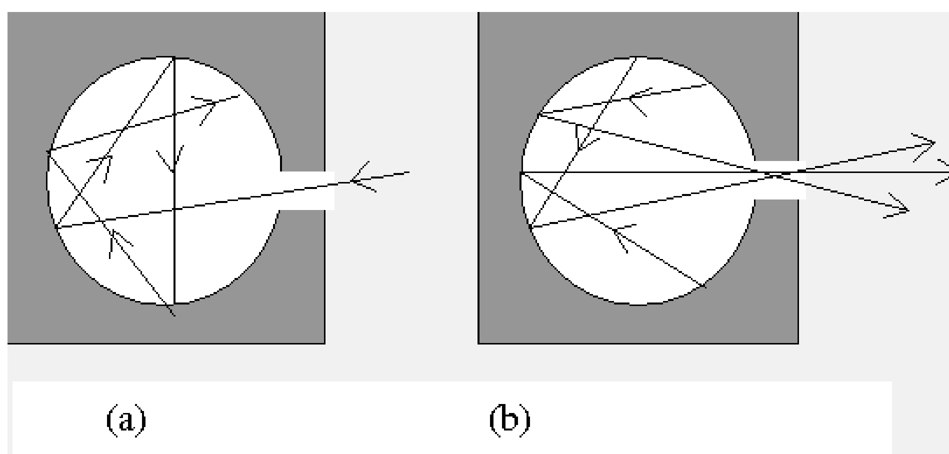
Việc nghiên cứu năng lượng của bức xạ nhiệt, các hiện tượng quang điện, hiệu ứng Compton đã đi đến kết luận rằng bức xạ điện từ, ngoài tính chất sóng, còn có có tính chất hạt. Trong lúc đó, các hạt vi mô lại thể hiện tính chất sóng. Từ đó hình thành nên trong vật lý một luận điểm về lưỡng tính sóng-hạt của vật chất. Lưỡng tính sóng hạt này là cơ sở cho các lý thuyết của cơ học lượng tử nói chung. Sau đây ta sẽ khảo sát một số hiện tượng và giả thuyết làm cơ sở cho việc hình thành nên cơ học lượng tử.

§ 2 TÍNH CHẤT HẠT CỦA BỨC XẠ

Trong mục này ta sẽ làm sáng tỏ sự bất lực của vật lý học cổ điển trong việc giải thích một số hiện tượng vi mô như bức xạ nhiệt, hiệu ứng quang điện và hiệu ứng Compton. Các hiện tượng chỉ có thể giải thích được bằng cách đưa ra khái niệm tính chất hạt của bức xạ.

2.1 BỨC XẠ NHIỆT VÀ VẬT ĐEN TUYỆT ĐỐI

Bức xạ nhiệt là bức xạ do vật ở nhiệt độ $T > 0\ K$ (còn gọi là vật nóng) phát ra. Các vật thông thường ở nhiệt độ phòng $T \approx 300K$ chủ yếu phát xạ bức xạ hồng ngoại ($\lambda_{max} = 10\ mm$), đó là bức xạ mà mắt con người không cảm nhận được. Khi nung nóng vật, bức xạ do vật phát ra có bước sóng giảm dần từ bức xạ hồng ngoại đến bức xạ khả kiến. Tuy nhiên, bức xạ do vật thông thường phát ra phụ thuộc không chỉ vào nhiệt độ mà còn phụ thuộc vào các tính chất khác của vật, chẳng hạn như hình dạng của vật, tính chất của bề mặt, bản chất của chất tạo nên vật... Nó cũng phụ thuộc vào việc vật phản xạ các bức xạ đến bề mặt của nó nhiều hay ít. Để tránh các khó khăn này người ta thường chọn



Hình 1.1: Mô hình của một vật đen tuyệt đối

vật bức xạ sao cho bề mặt của nó hấp thụ hoàn toàn các bức xạ chiếu đến. Vật như thế được gọi là vật đen tuyệt đối. Trong thực tế không có vật đen tuyệt đối, chỉ ở những khoảng bước sóng nào đó một số vật có thể có những tính chất gần với vật đen tuyệt đối. Chẳng hạn như trong miền bức xạ khả kiến thì bồ hóng và nhung đen có thể coi là vật đen tuyệt đối. Mẫu vật đen tuyệt đối hoàn hảo hơn là một lò kín không trong suốt, thành trong bôi đen và chỉ có một lỗ nhỏ O. Khi lò nguội ánh sáng từ bên ngoài đi vào đi qua lỗ nhỏ vào bên trong lò và khả năng đi ra khỏi lò là rất bé. Thật vậy, cứ mỗi lần phản xạ thành lò hấp thụ một phần năng lượng của bức xạ tới. Sau nhiều lần phản xạ năng lượng của bức xạ tới sẽ mất dần và cường độ bức xạ khi ra khỏi lò rất nhỏ so với cường độ bức xạ tới và có thể xem như bằng không (hình 1.1a). Khi lò nóng, ánh sáng phát ra ở bên trong lọt qua lỗ để ra ngoài, lúc này lò trở thành một nguồn phát bức xạ nhiệt (hình 1.1b).

2.2 ĐỊNH LUẬT STEFAN-BOLTZMANN

Năm 1879 bằng thực nghiệm Joseph Stefan đã tìm thấy rằng năng lượng toàn phần của bức xạ đối với một đơn vị diện tích bề mặt của vật đen (còn

được gọi là mật độ dòng năng lượng hoặc năng suất phát xạ) tỉ lệ với luỹ thừa bậc bốn của nhiệt độ tuyệt đối:

$$Q = \sigma T^4, \tag{1.1}$$

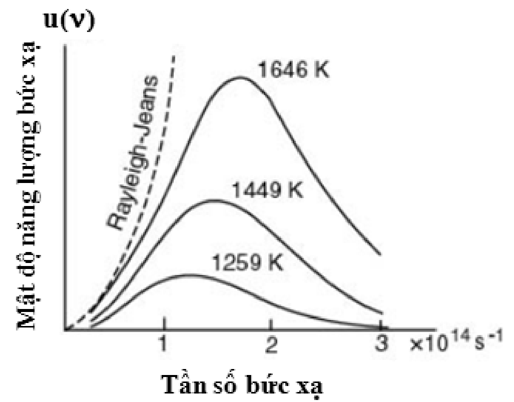
trong đó $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}\mathrm{Wm}^{-2}\mathrm{K}^{-4}$ là hằng số Stefan-Boltzmann. Biểu thức này được Ludwig Boltzmann chứng minh lý thuyết bằng phương pháp kết hợp giữa nhiệt động lực học và thuyết điện từ của Maxwell. Biểu thức (1.1) được gọi là định luật Stefan-Boltzmann và được các nhà thiên văn học sử dụng để tính độ sáng, bán kính hoặc nhiệt độ hiệu dụng của mặt trời và các sao.

2.3 ĐỊNH LUẬT RAYLEIGH-JEANS VÀ SỰ KHỦNG HOẢNG Ở MIỀN TỬ NGOẠI.

Định luật Rayleigh-Jeans diễn tả sự phân bố năng lượng trong phổ của vật đen như là hàm của nhiệt độ. Định luật này có thể viết dưới dạng:

$$u(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T, \tag{1.2}$$

trong đó $u(\nu)$ là mật độ năng lượng của bức xạ vật đen ứng với một đơn vị tần số ν, c là vận tốc ánh sáng, T là nhiệt độ tuyệt đối, k_B là hằng số Boltzmann ($k_B = 1,38.10^{-23} J/K$).



Hình 1.2: Phổ phát xạ của vật đen tuyệt đối. Đường liền nét là đường cong thực nghiệm. Đường đứt nét là đường cong theo công thức Raleigh-Jeans

Công thức này được thiết lập bởi Rayleigh năm 1900 trên cơ sở xem các bức xạ điện từ được phát ra trong hốc của vật đen như là một hệ sóng đứng. Ông cho rằng hệ sóng đứng này tương đương với các dao động tử điều hoà cổ điển của các hạt tích điện ở các thành của hốc. Từ năm 1905 đến 1909, J. Jeans

đã áp dụng phương pháp vật lý thống kê để khảo sát hệ sóng đứng trong hốc của vật đen và thu được phương trình như của Rayleigh.

Định luật Rayleigh-Jeans chỉ phù hợp với thực nghiệm ở miền tần số thấp (bước sóng dài). Khi tần số tăng lên mật độ năng lượng bức xạ tăng không giới hạn. Sự sai khác giữa lý thuyết và thực nghiệm này bắt đầu từ miền tử ngoại. Hơn nữa nếu lấy tích phân biểu thức (1.2) trên toàn miền biến thiên của tần số ta sẽ được một đại lượng vô cùng lớn. Đây là thất bại đầu tiên của vật lý học cổ điển về việc nghiên cứu bức xạ vật đen, các nhà vật lý gọi sự sai khác này là "sự khủng hoảng ở miền tử ngoại". Hình (1.2) chỉ phổ phát xạ của vật đen theo công thức Raleigh-Jeans và thực nghiệm. Bế tắc này tồn tại trong suốt một thời gian dài ở cuối thế kỷ 19 và chỉ được giải quyết khi có sự ra đời của thuyết lượng tử năng lượng của Planck năm cuối năm 1900.

2.4 THUYẾT LƯỢNG TỬ NĂNG LƯỢNG CỦA PLANCK

Để khắc phục sự khủng hoảng ở vùng tử ngoại gây ra do hệ quả của công thức Raleigh-Jeans mà cơ sở của nó dựa trên sự liên tục của năng lượng của sóng, Planck [1] đã cho rằng năng lượng của bức xạ nhiệt bị hấp thụ hay phát xạ không phải có giá trị bất kỳ mà bao giờ cũng là một bội số nguyên của một lượng năng lượng nguyên tố, được gọi là lượng tử năng lượng. Độ lớn của lượng tử năng lượng tỉ lệ với tần số bức xạ (tỉ lệ nghịch với bước sóng) theo công thức:

$$\varepsilon = h\nu = h\frac{c}{\lambda}, \tag{1.3}$$

trong đó hệ số $h = 6,625.10^{-34}$J.s là hằng số tác dụng, sau đó được gọi là hằng số Planck.

Về mặt lý thuyết Planck vẫn giữ ý tưởng của Rayleigh coi hệ sóng đứng

[1]Planck, Max Karl Ernst Ludwig (1858 - 1947): Nhà vật lý người Đức, nghiên cứu về sự phân bố phổ của bức xạ nhiệt và đã đưa ra thuyết lượng tử năng lượng (1900) mà nhờ đó ông được giải Nobel vật lý năm 1918

trong hốc là các dao động tử nhưng đây là các dao động tử lượng tử. Vì vậy, trong công thức (1.2) số hạng kT là năng lượng trung bình của dao động tử cổ điển được thay bằng năng lượng trung bình của dao động tử điều hoà lượng tử $\exp(h\nu/k_BT) - 1$. Từ đó công thức Rayleigh-Jeans được thay bằng công thức Planck:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\left(\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_BT}} - 1}\right). \tag{1.4}$$

Từ công thức Planck ta có thể suy ra công thức Rayleigh-Jeans và định luật Stefan-Boltzmann. Thật vậy, ở miền tần số bé $h\nu \ll k_BT$ thì $\exp(h\nu/k_BT) \equiv 1 + h\nu/k_BT$, lúc đó công thức (1.4) trở thành công thức (1.2). Ngoài ra, nếu lấy tích phân (1.4) theo toàn bộ miền biến thiên của tần số, ta được

$$Q(T) = \int_0^\infty u(\nu, T) = \int_0^\infty \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\left(\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_BT}} - 1}\right) d\nu. \tag{1.5}$$

Tích phân trên được tính bằng cách đặt $x = h\nu/k_BT$ và sử dụng tích phân đặc biệt $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x-1}dx = \frac{\pi^4}{15}$, ta được kết quả:

$$Q(T) = \sigma T^4. \tag{1.6}$$

Đây chính là định luật Stefan-Boltzmann như ở (1.1).

Ví dụ 2.1

a) Chứng tỏ rằng cực đại của mật độ năng lượng bức xạ trong biểu thức (1.4) xảy ra đối với bước sóng có dạng $\lambda_{max} = b/T$, với T là nhiệt độ, b là một hằng số cần được xác định.

b) Dùng hệ thức tìm được từ câu a) để ước tính nhiệt độ trên bề mặt một ngôi sao nếu phổ bức xạ mà nó phát ra có cực đại ở bước sóng 446 nm. Tìm cường độ bức xạ phát ra bởi ngôi sao này.

c) Ước tính bước sóng và cường độ của bức xạ phát ra bởi một dây tóc bóng đèn ở nhiệt độ 3300 K.

Lời giải

a) Vì $\nu = c/\lambda$, nên

$$d\nu = \left|\frac{d\nu}{d\lambda}\right| d\lambda = \frac{c}{\lambda^2} d\lambda.$$

Mật độ năng lượng bức xạ trong (1.4) có thể biểu diễn dưới dạng phụ thuộc vào bước sóng

$$\tilde{u}(\lambda, T) = u(\nu, T) \left|\frac{d\nu}{d\lambda}\right| = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1}.$$

Cực đại của $\tilde{u}(\lambda, T)$ ứng với $\partial\tilde{u}(\lambda, T)/\partial\lambda = 0$ cho ta

$$\frac{8\pi hc}{\lambda^5} \left[-5(1 - e^{-hc/\lambda k_BT}) + \frac{hc}{\lambda k_BT}\right] \frac{e^{hc/\lambda k_BT}}{\left(e^{hc/\lambda k_BT} - 1\right)^2} = 0,$$

từ đó:

$$\frac{\alpha}{\lambda} = 5(1 - e^{-\alpha/\lambda}), \tag{1.7}$$

trong đó $\alpha = hc/k_B T$.

Đặt $\alpha/\lambda = 5 - \varepsilon$, thay vào (1.7) ta được $5 - \varepsilon = 5 - 5e^{-5+\varepsilon}$. Giải ra ta được $\varepsilon \approx 5e^{-5} = 0,0337$, vì vậy $\alpha/\lambda = 5 - 0,0337 = 4,9663$.

Bước sóng ứng với cực đại của mật độ năng lượng trong công thức (1.4) được tính như sau:

$$\lambda_{max} = \frac{hc}{4,9663 k_B} \frac{1}{T} = \frac{2898,9 \times 10^{-6} m\ K}{T}. \tag{1.8}$$

Biểu thức này được gọi là định luật dịch chuyển Wein chỉ mối quan hệ tỉ lệ nghịch giữa bước sóng cực đại và nhiệt độ. b) Áp dụng công thức (1.8), ta tính được nhiệt độ bề mặt của sao

$$T = \frac{2898,9 \times 10^{-6} m\ K}{446 \times 10^{-9} m} \simeq 6500\ K. \tag{1.9}$$

Sử dụng định luật Stefan-Boltzmann (1.6) và giả sử rằng ngôi sao phát xạ như một vật đen, ta có thể tính năng suất phát xạ toàn phần tại bề mặt của sao:

$$\mathcal{P} = \sigma T^4 = 5,67 \times 10^{-8}\ W\ m^{-2}\ K^{-4} \times (6500\ K)^4 \simeq 101,2 \times 10^6\ W\ m^{-2}.$$

c) Bước sóng cực đại của bức xạ do dây tóc phát ra ở nhiệt độ 3300 K là

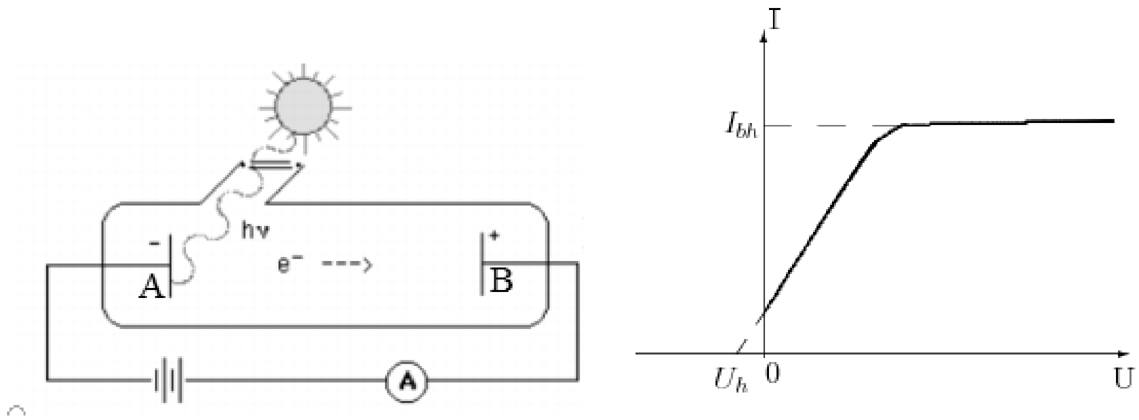
$$\lambda_{max} = \frac{2898,9 \times 10^{-6}\ m\ K}{3300\ K} \simeq 878,45\ \ \text{nm}.$$

Năng suất bức xạ toàn phần là

$$\mathcal{P} = \sigma T^4 = 5,67 \times 10^{-8}\ W\ m^{-2}\ K^{-4} \times (3300\ K)^4 \simeq 6,7 \times 10^6\ m^{-2}.$$

§ 3 THUYẾT LƯỢNG TỬ ÁNH SÁNG CỦA EINSTEIN

3.1 HIỆU ỨNG QUANG ĐIỆN



Hình 1.3: Hình bên trái: Thiết bị dùng để nghiên cứu hiện tượng quang điện. Hình bên phải: Sự phụ thuộc của dòng quang điện vào hiệu điện thế.

Hiệu ứng quang điện được trình bày chi tiết ở giáo trình quang học, ở đây chỉ trình bày tóm tắt bản chất của hiện tượng, các quy luật của hiệu ứng quang điện ngoài để có cơ sở đưa ra lý thuyết photon của Einstein nhằm giải thích hiện tượng này.

Chùm ánh sáng đơn sắc chiếu vào một đĩa kim loại A sẽ làm giải phóng các electron khỏi bề mặt kim loại. Các electron này (quang electron) sẽ tạo nên dòng điện nếu giữa 2 bản A và B có một hiệu điện thế. Dòng điện đó được gọi là dòng quang điện và được đo bởi điện kế G. Sự phụ thuộc của dòng quang điện vào

hiệu điện thế U_{AB} đặt vào hai bản A,B được mô tả ở hình vẽ trên. Nếu U_{AB} đủ lớn thì dòng quang điện sẽ đạt giá trị giới hạn và được gọi là dòng quang điện bão hòa. Nếu ta đổi dấu của U_{AB} thì dòng quang điện không giảm đột ngột đến giá trị 0, điều này chứng tỏ các quang electron bay ra từ bản A có một vận tốc hữu hạn nào đó. Với vận tốc đó một số electron sẽ dịch chuyển đến bản B mặc dù điện trường giữa A và B lúc này hướng từ A đến B nghĩa là ngược hướng với chuyển động của electron.

Với một hiệu điện thế nghịch U_h đủ lớn thì dòng quang điện triệt tiêu. U_h được gọi là hiệu điện thế hãm. Như vậy vận tốc ban đầu cực đại của quang electron liên hệ với hiệu điện thế hãm theo công thức

$$\frac{1}{2}mv_{0max}^2 = eU_h. \tag{1.10}$$

3.2 CÁC ĐỊNH LUẬT QUANG ĐIỆN

Thực nghiệm đã đưa ra được các định luật sau về hiệu ứng quang điện:

- Định luật về giới hạn quang điện: Hiệu ứng quang điện chỉ xảy ra khi bước sóng của ánh sáng tới λ nhỏ hơn một giá trị $\lambda_0 = hc/A$ nào đó được gọi là giới hạn quang điện, với A là công thoát của electron ra khỏi kim loại.

- Định luật về dòng quang điện bảo hòa: Cường độ dòng quang điện bảo hòa tỉ lệ với cường độ ánh sáng tới (khi $\lambda \leq \lambda_0$).

- Định luật về vận tốc ban đầu của quang electron: Vận tốc ban đầu của quang electron không phụ thuộc vào cường độ ánh sáng tới mà tỉ lệ bậc nhất với tần số ánh sáng tới.

Thuyết sóng về ánh sáng không thể giải thích được các định luật này của hiệu ứng quang điện. Theo thuyết này thì năng lượng của ánh sáng là một đại lượng liên tục và tỉ lệ với cường độ sáng, do đó khi năng lượng của ánh sáng

tới lớn thì electron sẽ nhận được nhiều năng lượng và hiện tượng quang điện sẽ xảy ra không phụ thuộc vào bước sóng ánh sáng tới.

3.3 THUYẾT LƯỢNG TỬ ÁNH SÁNG CỦA EINSTEIN

Dựa trên thuyết lượng tử năng lượng của Planck, Einstein [2] cho rằng lượng tử năng lượng không chỉ là một tính chất đặc thù của bức xạ nhiệt của vật đen tuyệt đối mà là tính chất chung của mọi bức xạ điện từ. Năng lượng của sóng điện từ được truyền đi không phải dưới dạng một dòng liên tục mà dưới dạng từng phần tử rất nhỏ gọi là lượng tử. Như vậy có thể coi bức xạ điện từ được cấu tạo từ các hạt rất nhỏ gọi là photon. Mỗi photon ứng với bức xạ tần số có năng lượng:

$$E = h\nu. \tag{1.11}$$

Vì photon được coi là hạt ánh sáng nên nó có khối lượng và xung lượng. Theo thuyết tương đối khối lượng của photon là:

$$m = \frac{E}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2}, \tag{1.12}$$

và xung lượng là:

$$p = mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \tag{1.13}$$

Nếu dùng vectơ sóng:

$$\vec{k} \quad \text{với} \quad |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{thì (1.13) được viết lại như sau :}$$

$$\vec{p} = \frac{h}{2\pi}\vec{k} = \hbar\vec{k} \quad \text{với} \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}. \tag{1.14}$$

Bây giờ ta dùng thuyết photon để giải thích các định luật quang điện:

---

[2]Einstein, Albert (1879-1955), Người Mỹ gốc Đức, nhà vật lý nổi tiếng thế giới nhờ phát minh ra thuyết tương đối đặc biệt và thuyết tương đối tổng quát. Ông cũng đưa ra thuyết photon liên quan đến bản chất hạt của ánh sáng. Ông được gải Nobel vật lý năm 1921 nhờ công lao đóng góp cho vật lý lý thuyết và đặc biệt là việc phát minh ra thuyết photon để giải thích các định luật của hiệu ứng quang điện.

Chùm ánh sáng tới bề mặt kim loại được coi là một chùm photon. Khi một hạt photon va chạm với một electron thì nó sẽ truyền toàn bộ năng lượng của mình cho electron. Electron sử dụng năng lượng này để làm hai việc: một là tự giải phóng mình, nghĩa là thoát khỏi lực liên kết của tinh thể kim loại, sau đó bay ra khỏi kim loại với một vận tốc ban đầu nào đó. Định luật bảo toàn năng lượng cho ta:

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = W + \frac{mv_{0max}^2}{2}. \tag{1.15}$$

Từ công thức này ta thấy hiệu ứng quang điện chỉ xảy ra khi $hc/\lambda \geq W$, hay $\lambda \leq hc/W$.

Như vậy, hiệu ứng quang điện chỉ xảy ra khi bước sóng của ánh sáng tới λ nhỏ hơn giá trị hc/W (được đặt là λ_0). Đây chính là nội dung của định luật quang điện I.

Theo quan điểm lượng tử thì cường độ ánh sáng tới bề mặt kim loại được xác định bởi số photon tới trong một đơn vị thời gian, trên một đơn vị diện tích. Như vậy số quang electron sẽ tỉ lệ với số photon tới, điều đó có nghĩa là cường độ dòng quang điện tỉ lệ với cường độ ánh sáng tới, đây là nội dung của định luật quang điện II. Từ 1.15 ta suy ra:

$$E_K = \frac{mv_{0max}^2}{2} = \frac{hc}{\lambda} - W. \tag{1.16}$$

Như vậy động năng ban đầu cực đại của quang electron không phụ thuộc vào cường độ ánh sáng tới mà phụ thuộc vào bước sóng của nó, đây là nội dung của định luật quang điện thứ 3.

Ví dụ 3.1

Hai chùm tia UV có bước sóng là 80 nm và 110 nm chiếu vào bề mặt của kim loại chì, các electron quang điện được tạo ra có động năng cực đại lần lượt là 11,390 eV và 7,154 eV.

a) Ước tính giá trị bằng số của hằng số Planck

b) Tính công thoát của chì.

Lời giải:

Theo công thức (1.16), ta có: $E_{K1} = hc/\lambda_1 - W$ và $E_{K2} = hc/\lambda_2 - W$, từ đó:

$$E_{K1} - E_{K2} = \frac{hc(\lambda_2 - \lambda_1)}{\lambda_1 \lambda_2},$$

hay:

$$h = \frac{E_{K1} - E_{K2}}{c} \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1}$$

Thay các giá trị các đại lượng đã cho vào phương trình trên, ta tính được giá trị của h là $6,627 \times 10^{-34}$ Js.

b) Công thoát của kim loại được tính từ công thức:

$$W = \frac{hc}{\lambda_1} - E_{K1},$$

tính ra ta được: $W = 6,627 \times 10^{-19} = 4,14$ eV.

§ 4 HIỆU ỨNG COMPTON

Tính chất hạt của ánh sáng còn được thể hiện rõ rệt ở hiện tượng mà Compton [3] đã phát hiện năm 1923 khi quan sát sự tán xạ của tia X lên tinh thể graphite. Compton đã cho 1 chùm tia X đơn sắc có bước sóng λ chiếu vào tinh thể graphite thì thấy rằng sau khi đi qua chất này chùm tia X bị tán xạ. Kết quả thí nghiệm cho thấy rằng chùm tia tán xạ có bước sóng λ' lớn hơn bước sóng của tia tới. Độ chênh lệch bước sóng $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta)$ chỉ phụ thuộc vào góc θ giữa phương của tia tới và tia tán xạ (góc tán xạ):

$$\Delta\lambda = \lambda_C(1 - \cos\theta), \tag{1.17}$$

trong đó $\lambda_C = 2,43\ 10^{-12}$m là một hằng số được xác định từ thực nghiệm.

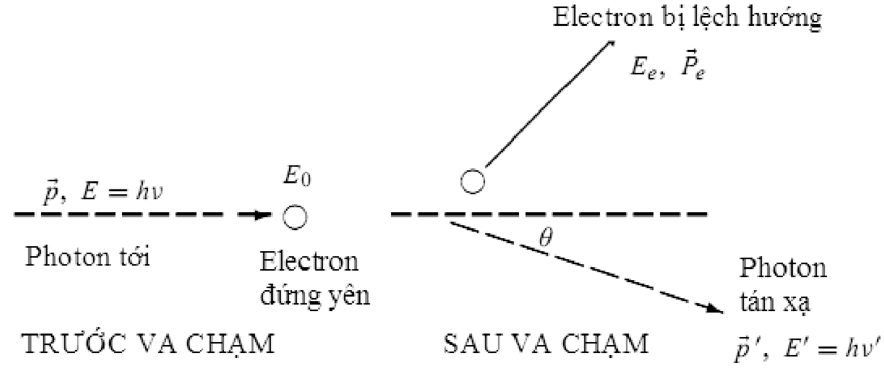
Sự thay đổi bước sóng của tia X sau khi bị tán xạ không thể giải thích được trên quan điểm sóng. Thực vậy, nếu xem tia X là sóng có bước sóng λ thì khi

[3] Compton, Arthur Holly (1892-1962), Nhà vật lý học người Mỹ nghiên cứu về tia X và đã tìm ra hiệu ứng mang tên mình năm 1923. Hiệu ứng Compton khẳng định rằng bức xạ điện từ có lưỡng tính sóng hạt, đó là một lý thuyết cơ bản của cơ học lượng tử. Ông được giải Nobel vật lý năm 1927

tán xạ lên electron của tinh thể, năng lượng của sóng làm cho electron dao động và phát ra sóng điện từ có cùng bước sóng với sóng tới. Hiệu ứng Compton chỉ có thể giải thích trên quan điểm thuyết lượng tử ánh sáng của Einstein.

Coi chùm tia X tới không phải là sóng mà là một dòng hạt photon có năng lượng $E = h\nu$ và xung lượng $|\vec{p}| = \text{h}\nu/c$. Khi photon va chạm với một electron thì photon tới truyền một phần năng lượng của mình cho electron, do đó photon tán xạ có năng lượng $E' < E$, vì thế nó có tần số $\nu\,' < \nu$ hay bước sóng $\lambda' > \lambda$.

Bây giờ ta sẽ tính độ dịch chuyển $\Delta\lambda$ của sóng tán xạ. Hình 1.4 chỉ sơ đồ va



Hình 1.4: Tán xạ Compton của photon (năng lượng $h\nu$, xung lượng $\vec{p}$) với electron tự do đứng yên. Sau va chạm photon bị tán xạ một góc θ với năng lượng $h\nu'$.

chạm của một photon với một electron. Giả sử ban đầu electron đứng yên. Năng lượng và xung lượng của photon trước va chạm là $E = hc/\lambda$ và $p = h/\lambda$, sau va chạm là $E' = hc/\lambda$' và $p\,' = h/\lambda$'. Năng lượng và xung lượng của electron trước tán xạ là m_0c^2 và 0, sau tán xạ là mc^2 và $\vec{p}_e$. Khi áp dụng định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng, ta được:

$$\frac{hc}{\lambda} + m_0c^2 = \frac{hc'}{\lambda'} + mc^2, \tag{1.18}$$

$$\vec{p} = \vec{p}_e + \vec{p}\,'. \tag{1.19}$$

Từ (1.18) ta được:

$$\begin{aligned}(mc^2)^2 = &\frac{h^2c^2}{\lambda^2\lambda'^2}(\lambda^2+\lambda'^2) - \frac{2h^2c^2}{\lambda\lambda'}\\ &+\frac{2hm_0c^3}{\lambda\lambda'}(\lambda-\lambda')+(m_0c^2)^2.\end{aligned} \tag{1.20}$$

Biểu thức (1.19) cho ta sơ đồ sau:

Vì $\vec{p}_e = \vec{p} - \vec{p}'$, nên ta suy ra:

$\vec{p}_e\vec{p}_e = p_e^2 + p'^2 - 2\vec{p}\vec{p}\,' = \dfrac{h^2}{\lambda^2\lambda'^2}(\lambda'^2 + \lambda^2 - 2\lambda\lambda'\cos\theta)$

Mặt khác, theo thuyết tương đối: $mc^2 = p_e c + m_0 c^2$. Bình phương hai vế của hệ thức này rồi thay vào (1.20) ta được:

$$\begin{aligned}&\frac{h^2c^2}{\lambda^2\lambda'^2}(\lambda^2+\lambda'^2) - \frac{2h^2c^2}{\lambda\lambda'} + \frac{2hm_0c^3}{\lambda\lambda'} + (m_0c^2)^2\\ &= \frac{h^2c^2}{\lambda^2\lambda'^2}(\lambda'^2+\lambda^2-2\lambda\lambda'\cos\theta)+(m_0c^2)^2,\end{aligned}$$

do đó:

$$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = (h/m_0c)(1-\cos\theta).$$

Như vậy, công thức (1.17) đã được chứng minh trên cơ sở xem chùm tia X là một dòng hạt photon. Độ dịch chuyển Compton $\Delta\lambda$ chỉ phụ thuộc vào góc tán xạ θ mà không phụ thuộc vào bước sóng của bức xạ tới.

Ví dụ 4.1

Chứng minh rằng trường hợp tán xạ không đàn hồi giữa electron và photon thì photon không bị hấp thụ do định luật bảo toàn năng - xung lượng.

Lời giải:

Giả sử trước va chạm electron đứng yên. Định luật bảo toàn năng lượng và xung lượng có dạng:

$$\hbar\omega + E_0 = E(p), \tag{1.21}$$

$$\frac{\hbar\omega}{c} = p, \tag{1.22}$$

trong đó $E_0 = m_e c^2$ là năng lượng nghỉ của electron. Năng lượng của electron chuyển động có dạng:

$$E(p) = c\sqrt{m_e^2 c^2 + p^2}. \tag{1.23}$$

Bình phương hai vế của (1.21), (1.22) và để ý đến (1.23), ta được:

$$\hbar^2\omega^2 + 2m_e c^2\hbar\omega = c^2 p^2, \tag{1.24}$$

$$\hbar^2\omega^2 = c^2 p^2. \tag{1.25}$$

Khi $m_e \neq 0$ thì hai biểu thức này mâu thuẩn nhau. Vì vậy ta có thể kết luận rằng tán xạ không đàn hồi giữa một photon và một electron tự do là không xảy ra, nghĩa là electron tự do không thể hấp thụ photon.

§ 5 GIẢ THUYẾT DE BROGLIE - TÍNH CHẤT SÓNG CỦA HẠT VẬT CHẤT

5.1 LƯỠNG TÍNH SÓNG HẠT CỦA ÁNH SÁNG

Như vậy, ta có thể coi photon có các tính chất sau: không có khối lượng nghỉ, chuyển động với vận tốc ánh sáng, nó có thể tác dụng như là một hạt nhưng lại dịch chuyển như một sóng, nó có thể chịu sức hút của trọng lực mặc dầu không có khối lượng nghỉ. Một câu hỏi hắc búa khó trả lời nhất là ánh sáng thực ra là hạt hay sóng. Các hiện tượng thực nghiệm về giao thoa, nhiễu xạ cho thấy ánh sáng là sóng, trong lúc đó hiệu ứng quang điện và hiệu ứng Compton chứng tỏ rằng ánh sáng là hạt.

Vì vậy ta phải đi đến kết luận rằng rằng ánh sáng không phải là hạt mà cũng không phải là sóng mà nó vừa là hạt vừa là sóng. Việc thể hiện tính chất hạt hoặc tính chất sóng phụ thuộc vào đối tượng mà ánh sáng tác dụng. Các thí nghiệm về giao thoa, nhiễu xạ phát hiện tính chất sóng, trong lúc thí nghiệm về hiện tượng quang điện phát hiện tính chất hạt của ánh sáng.

Như vậy ta đi đến kết luận về lưỡng tính sóng hạt của ánh sáng. Ta không thể nói bức tranh sóng hay bức tranh hạt là đúng mà cả hai đều cần thiết cho

việc mô tả đầy đủ các hiện tượng vật lý và trong thực tế chúng bổ sung cho nhau.

5.2 GIẢ THUYẾT DE BROGLIE VỀ SÓNG VẬT CHẤT

Lưỡng tính sóng-hạt đã đề cập ở phần (5.1) liệu có phải chỉ là tính chất riêng của ánh sáng (sóng điện từ nói chung) hay đó là tính chất chung cho mọi đối tượng vật chất. Trong luận án tiến sĩ của mình năm 1924, De Broglie đã đưa ra một giả thuyết táo bạo rằng các hạt vật chất cũng có tính chất sóng[4]. Ông cho rằng một hạt vật chất bất kỳ khối lượng m chuyển động với xung lượng $\vec{p}$ thì tương ứng với một sóng có bước sóng λ, liên hệ với xung lượng theo hệ thức:

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|} = \frac{h}{mv}. \tag{1.26}$$

Sau này ta gọi sóng tương ứng với hạt vật chất là sóng De Broglie và bước sóng trong công thức (1.26) được gọi là bước sóng De Broglie. Áp dụng công thức (1.26) ta có thể tính được bước sóng De Broglie ứng với các vật khác nhau, ví dụ:

(1) Chiếc xe khối lượng 1000 kg, chuyển động với vận tốc 100 m/s thì bước sóng De Broglie là $6,6 \times 10^{-39}$ m.

(2) Viên đạn khối lượng 10 g, vận tốc 500 m/s thì bước sóng De Broglie là $1,3 \times 10^{-34}$m.

(3) Hạt bụi có khối lượng 10^-6 g, vận tốc 1 cm/s thì $\lambda = 6,6 \times 10^{-23}$ m.

(4) Electron có năng lượng 1eV thì xung lượng là $p = \sqrt{2mT} = 5,4 \times 10^{-25}$ kgm/s, bước sóng De Broglie tương ứng là $1,2 \times 10^{-9}$ m = 1,2 nm.

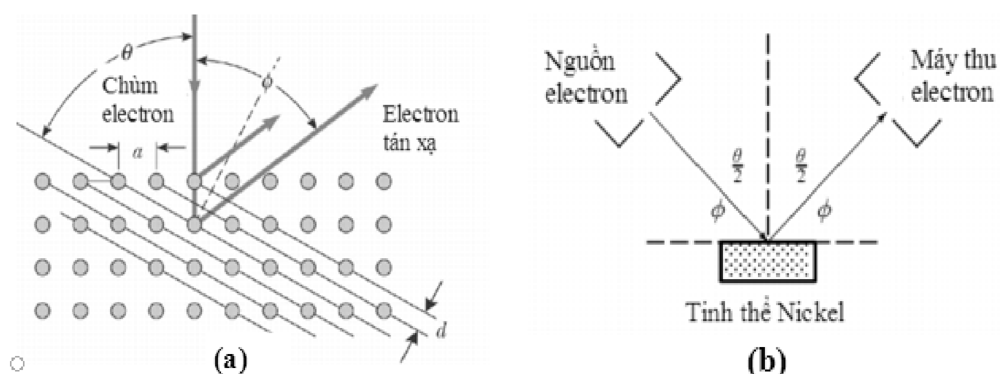
Ta nhận thấy rằng bước sóng tính ở 3 ví dụ đầu tiên có giá trị quá bé để có thể quan sát được bằng thực nghiệm. Chỉ có ở ví dụ 4 thì bước sóng electron có cùng bậc với khoảng cách các nguyên tử trong tinh thể nên ta có thể quan sát được bằng thực nghiệm nhờ hiện tượng nhiễu xạ electron lên tinh thể.

---

[4]De Broglie được tặng giải Nobel Vật lý năm 1929 về công trình này và là người đầu tiên nhận giải Nobel nhờ luận án tiến sĩ.

5.3 THÍ NGHIỆM KIỂM CHỨNG GIẢ THUYẾT DE BROGLIE

Giả thuyết De Broglie về tính sóng của hạt vi mô được kiểm chứng nhờ hai thí nghiệm độc lập nhau, một của Davisson và Germer ở Mỹ (1926) [5] và một của G. P. Thomson ở Anh (1927)[6]. Davisson và Germer đã sử dụng sự nhiễu



Hình 1.5: (a): Mô hình nhiễu xạ electron lên tinh thể. (b): Sơ đồ thí nghiệm Davisson-Germer: electron đập vào bề mặt tinh thể Nickel một góc ϕ, máy thu electron, đặt đối xứng với nguồn phát electron để đo số electron tán xạ.

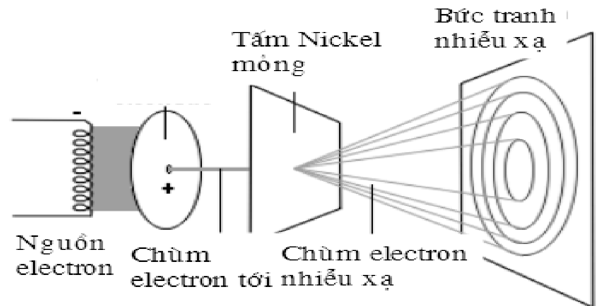
xạ của electron lên bề mặt tinh thể Nickel và quan sát được sự giao thoa của chùm electron phản xạ từ bề mặt tinh thể. Điều đó chứng tỏ electron có tính chất sóng, đồng thời thí nghiệm cũng đã tính được bước sóng của electron có giá trị cỡ $0,167$ nm (hình 1.5).

Thomson đã nghiên cứu sự truyền electron qua một màng mỏng kim loại. Nếu electron xử sự như các hạt thì trên màn hứng chùm electron ló ta sẽ được một ảnh mờ. Nhưng trên thực tế Thomson đã thu được trên màn một hình ảnh nhiễu xạ, điều này chứng tỏ chùm electron đi qua màng kim loại có tính chất

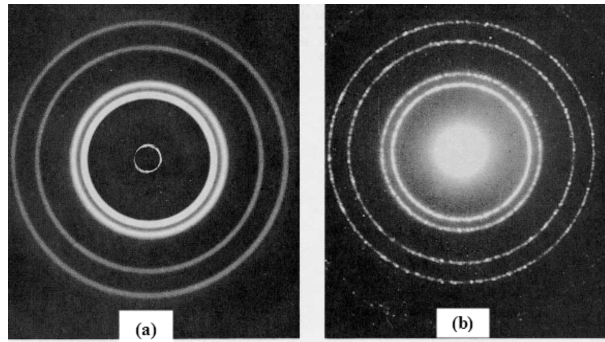
[5]Davisson, Clinton Joseph (1881-1958), nhà vật lý người Mỹ đã có nhiều đóng góp trong việc nghiên cứu sự nhiễu xạ của electron lên tinh thể. Ông được giải Nobel Vật lý năm 1937 cùng với nhà vật lý người Anh G. P. Thomson

[6]Thomson, Sir George Paget (1892-1975), nhà vật lý người Anh, người đã chứng minh được tính chất sóng của electron và cùng Davisson chia giải Nobel năm 1937. Điều thú vị là G. P. Thomson, người chứng minh tính chất sóng của electron là con của J. J Thomson (Thomson, Sir Joseph John (1856-1940)), người chứng minh tính chất hạt của electron. Cả hai cha con đều được giải Nobel, cách nhau 31 năm.

sóng (hình 1.6). Hình 1.7 cho ta hình ảnh nhiễu xạ của electron so với nhiễu xạ tia X qua một tấm kim loại mỏng.



Hình 1.6: Sơ đồ thí nghiệm Thomson.



Hình 1.7: (a) Hình ảnh nhiễu xạ tia X qua một tấm nhôm mỏng. (b) Hình ảnh nhiễu xạ electron qua một tấm nhôm mỏng

§ 6 HÀM SÓNG CỦA HẠT VI MÔ - Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA HÀM SÓNG

6.1 HÀM SÓNG CỦA HẠT TỰ DO

Theo giả thuyết De Broglie, một hạt vật chất (mức độ vi mô) thì tương ứng với một sóng được mô tả bởi hàm sóng $\Psi(\vec{r}, t)$. Một cách tổng quát $\Psi(\vec{r}, t)$ là một hàm phức, đơn trị, liên tục của toạ độ không gian $\vec{r}$ và thời gian t. Việc tìm hàm sóng ứng với hạt vi mô là một nhiệm vụ cơ bản của cơ học lượng tử.

Đối với một hạt chuyển động tự do khối lượng m, xung lượng $\vec{p}$, năng lượng $E = p^2/2m$ thì sóng tương ứng là sóng phẳng đơn sắc được mô tả bởi hàm sóng dạng:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r}-Et)}, \quad \text{với } \omega = E/\hbar; \vec{k} = \vec{p}/\hbar, \tag{1.27}$$

trong đó biên độ A của hàm sóng được xác định bởi

$$A^2 = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t)^*\Psi(\vec{r}, t). \tag{1.28}$$

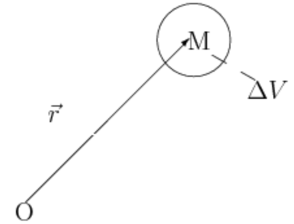
Sóng có hàm sóng dạng (1.27) được gọi là sóng De Broglie cho hạt tự do.

6.2 Ý NGHĨA THỐNG KÊ CỦA HÀM SÓNG

Theo cách giải thích của Born [7] thì *bình phương môđun của hàm sóng tỉ lệ với mật độ xác suất tìm hạt tại điểm xác định bởi toạ độ $\vec{r}$ và ở thời điểm t.* Gọi W là xác suất tìm hạt ở trong phần tử thể tích ΔV bao quanh điểm M có bán kính vectơ $\vec{r} = \overrightarrow{OM}$, lúc đó mật độ xác suất tìm hạt ρ được xác định như sau:

$$\rho(\vec{r}, t) = \lim_{\Delta V \to 0} \frac{\Delta W}{\Delta V} = \frac{dW}{dV},$$

trong đó ΔW là xác suất tìm hạt trong phần tử thể tích ΔV bao quanh điểm M (Hình 1.8).



Hình 1.8: Phần tử thể tích ΔV bao quang điểm M có bán kính vectơ $\vec{r}$

Theo giải thích của Born thì ta có:

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{dW}{dV} \sim |\Psi(\vec{r}, t)|^2. \tag{1.29}$$

---

[7] Born, Max (1882-1970), sinh tại Ba Lan, học đại học tại Đức. Năm 1933 ông di cư qua Anh và làm việc tại đại học Cambridge. Ông có nhiều đóng góp trong việc nghiên cứu vật lý lý thuyết. Max Born chia giải Nobel cùng với Walter Bothe (Đức) năm 1954

6.3 SỰ CHUẨN HÓA HÀM SÓNG

Như vậy ta thấy rằng theo ý nghĩa thống kê của hàm sóng thì: $\rho \sim |\Psi(\vec{r},t)|^2$. Ta có thể viết:

$$\rho = \mathbb{C}|\Psi(\vec{r},t)|^2. \tag{1.30}$$

Để đơn giản ta thường chọn hệ số $\mathbb{C} = 1$. Lúc đó $\rho = |\Psi(\vec{r},t)|^2$. Xác suất tìm hạt trong toàn bộ không gian là:

$$W = \int_V \rho(\vec{r},t)dV = \int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV. \tag{1.31}$$

Do xác suất này bằng đơn vị nên ta có điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng như sau:

$$\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1. \tag{1.32}$$

Hàm sóng thỏa mãn điều kiện (1.32) được gọi là hàm sóng đã chuẩn hoá. Nếu hệ số $\mathbb{C}$ trong (1.30) khác đơn vị thì ta nói hàm sóng chưa được chuẩn hoá. Lúc đó điều kiện (1.32) trở thành

$$W = \int_V \rho(\vec{r},t)dV = \mathbb{C}\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1. \tag{1.33}$$

Từ đó:

$$\mathbb{C} = \frac{1}{\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV}. \tag{1.34}$$

Như vậy, xác suất tìm hạt trong phần tử thể tích dV là:
+ trường hợp hàm sóng đã chuẩn hoá:

$$dW = |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV; \tag{1.35}$$

+ trường hợp hàm sóng chưa chuẩn hoá:

$$dW = \frac{|\Psi(\vec{r},t)|^2 dV}{\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV}. \tag{1.36}$$

6.4 ĐIỀU KIỆN TIÊU CHUẨN CỦA HÀM SÓNG

Hàm sóng trong cơ lượng tử phải thỏa mãn các điều kiện sau:

(1) Hàm sóng phải giới nội: đây là một yêu cầu để cho tích phân trong (1.32) hội tụ.

(2) Hàm sóng phải đơn trị: điều đó có nghĩa là ứng với mỗi hàm sóng thì chỉ có một xác suất tìm hạt.

(3) Hàm sóng phải liên tục: điều này ứng với việc định nghĩa mật độ xác suất $\rho = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ là một hàm liên tục.

(4) Đạo hàm bậc nhất của hàm sóng phải liên tục: yêu cầu này được rút ra từ điều kiện của phương trình mà hàm sóng phải thỏa mãn (sẽ xét chi tiết ở chương IV).

Ví dụ: 6.1:

Một hạt chuyển động trên trục x ứng với hàm sóng:

$$\Psi(x, t) = Ae^{i\omega t}e^{-x^2/2a^2}.$$

Hãy xác định hệ số A từ điều kiện chuẩn hoá.

Lời giải:

Một cách tổng quát ta xem khoảng biến thiên của x là $-\infty < x < +\infty$. Điều kiện chuẩn hoá là:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t}e^{+i\omega t}e^{-x^2/a^2}dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2}dx.$$

Sử dụng tích phân Poisson $I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{(\pi/\alpha)}$, ta tính được:

$$A = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}.$$

Hàm sóng chuẩn hoá là: $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}e^{i\omega t}e^{-x^2/2a^2}$.

Ví dụ: 6.2:

Cho hàm sóng có dạng:

$$\Psi(r, t) = C\frac{e^{-iEt/\hbar}}{r^2},$$

trong đó $r \geq R$. Tính xác suất tìm hạt trong lớp cầu $R \geq r \geq 2R$.

Lời giải:

Ta sử dụng hệ toạ độ cầu, trong đó phần tử thể tích có dạng: $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$. Điều kiện chuẩn hoá là:

$$\begin{aligned}\int_V |\Psi(r,t)|^2 dV &= |C|^2 \int_R^\infty \frac{r^2}{r^4} dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= 4\pi C^2 \int_R^\infty \frac{1}{r^2} dr = \frac{4\pi C^2}{R} = 1.\end{aligned}$$

Từ đó hằng số chuẩn hoá C là: $C = \sqrt{R/4\pi}$. Xác suất tìm hạt trong lớp cầu $R \geq r \geq 2R$ là:

$$\int_R^{2R} |\Psi(r,t)|^2 4\pi r^2 dr = R \int_R^{2R} \frac{dr}{r^2} = R\left(\frac{1}{R} - \frac{1}{2R}\right) = \frac{1}{2}.$$

§ 7 BÓ SÓNG

Trong vật lý cổ điển, một hạt hoàn toàn định xứ trong trong gian, Vị trí và vận tốc của nó có thể xác định được đồng thời. Trong cơ lượng tử tính chất sóng của hạt được mô tả bởi hàm sóng. Tuy nhiên, hàm sóng không định xứ. Nếu hàm sóng triệt tiêu khắp nơi, ngoại trừ lân cận hạt hoặc lân cận "quỹ đạo cổ điển" của hạt thì ta có thể dùng nó để mô tả hạt. Điều này có nghĩa hạt định xứ bên trong một miền không gian nào đó có thể được mô tả bởi một sóng có biên độ lớn trong miền đó và bằng không ở bên ngoài miền đó. Một hàm sóng định xứ được gọi là bó sóng (wave packet). Như vậy, bó sóng gồm một nhóm các sóng có bước sóng khác nhau rất ít, có pha và biên độ được chọn sao cho chúng tạo ra các cực đại giao thoa ở một miền nhỏ của không gian và cực tiểu giao thoa ở những nơi khác. Vì vậy để mô tả vị trí của hạt vi mô ta dùng khái niệm bó sóng.

7.1 BÓ SÓNG ĐỊNH XỨ

Bó sóng định xứ có thể được tạo ra bằng cách chồng chất các sóng có bước sóng gần nhau ở trong cùng một miền không gian. Về mặt toán học, sự chồng chất này có thể được biểu diễn bằng phép biến đổi Fourier. Ta xét trường hợp bó sóng biểu diễn hạt chuyển động một chiều theo trục x. Bó sóng ta xét là chồng chất của các sóng phẳng đơn sắc:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx-\omega t)} dk. \tag{1.37}$$

Trước hết ta xét bó sóng tại thời điểm t=0,

$$\Psi(x,0) \equiv \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk, \tag{1.38}$$

trong đó $\phi(k)$ là biến đổi Fourier của $\psi_0(x)$,

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) e^{-ikx} dx. \tag{1.39}$$

Hệ thức (1.38) và (1.39) chứng tỏ rằng $\phi(k)$ xác định $\psi_0(x)$ và ngược lại. Bó sóng (1.38) có dạng phụ thuộc vào x, có một cực đại tại x=0. Tương tự bó sóng (1.39) cũng có một cực đại tại k=0.

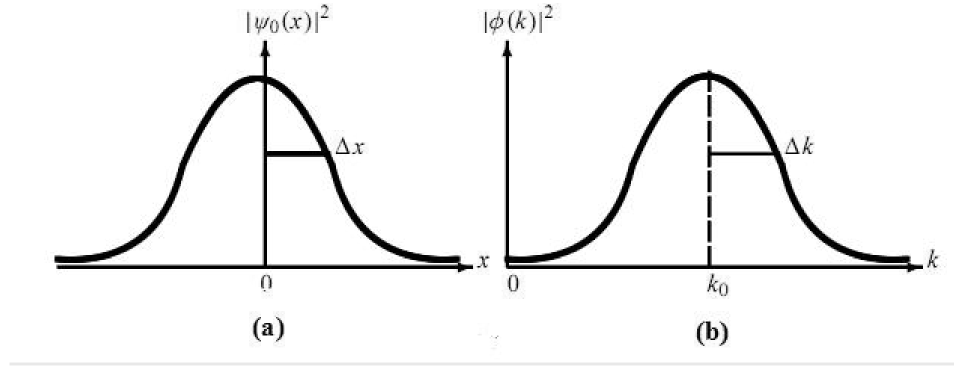
Hình 1.9 chỉ một loại bó sóng tiêu biểu có tính định xứ. Ý nghĩa vật lý của bó sóng được giải thích như sau:

Bình phương mô-đun của hàm $\psi_0(x)$ cho ta mật độ xác suất tìm hạt tại điểm x, trong lúc đó bình phương mô-đun của hàm $\phi(k)$ cho ta mật độ xác suất để đo độ lớn của vectơ sóng của hạt, đại lượng $P(k)dk = |\phi(k)|^2 dk$ cho ta xác suất tìm hạt có vectơ sóng nằm trong khoảng từ k đến $k + dk$.

7.2 BÓ SÓNG VÀ HỆ THỨC BẤT ĐỊNH

1. Hệ thức bất định Heisenberg

Như đã đề cập ở phần 1 của chương này, các quy luật trong cơ học cổ điển có tính tất định, nghĩa là nếu ta biết được tọa độ ban đầu, vận tốc ban đầu và



Hình 1.9: Hai sóng định xứ: (a) $\psi_0(x) = (2/\pi a^2)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x}$ và (b) $\phi(k) = (a^2/2\pi a^2)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2/4}$.

tất cả các lực tác dụng lên hạt thì ta sẽ xác định được vị trí và vận tốc của hạt tại một thời điểm t bất kỳ bằng định luật II Newton. Ngược lại với vật lý học cổ điển, trong thế giới vật lý vi mô, do hạt có tính chất sóng và được đặc trưng bởi một sóng không định xứ, nên hạt trải rộng trong không gian mà không định xứ được. Như vậy, khái niệm cổ điển về tọa độ chính xác, xung lượng chính xác và quỹ đạo xác định của hạt mất hết ý nghĩa trong cơ học lượng tử. Đây là bản chất của hệ thức bất định do Heisenberg đưa ra năm 1927.

Hệ thức bất định Heisenberg chỉ ra rằng: "Nếu xung lượng của hạt đo được với một độ không chính xác (độ bất định) Δp_x thì tọa độ của nó không thể đo chính xác hơn một lượng $\Delta x = \hbar/(2\Delta p_x)$". Trong trường hợp 3 chiều, hệ thức bất định Heisenberg được biểu diễn bởi:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}; \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{1.40}$$

Ví dụ:

a) Một neutron chuyển động với vận tốc $5 \times 10^6 m/s$ thì độ bất định về vận tốc là:

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \simeq \frac{\hbar}{2m_n v} = \frac{1,05 \times 10^{-34}\ Js}{2 \times 1,65 \times 10^{-27}\ kg \times 5 \times 10^6\ ms^{-1}} = 6,4 \times 10^{-15}\ m.$$

Độ bất định này tương ứng với kích thước của hạt nhân.

b) Một người khối lượng 50 kg chuyển động với vận tốc 2 m/s thì độ bất định về vị trí là

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \simeq \frac{\hbar}{2m_n v} = \frac{1,05 \times 10^{-34}\ Js}{2 \times 50\ kg \times 2\ ms^{-1}} = 0,5 \times 10^{-36}\ m$$

Độ lớn của Δx trong trường hợp nhỏ đến mức vượt quá mọi sự đo đạc của con người, vì vậy có thể bỏ qua. Vì vậy, ta có thể nói rằng độ bất định về tọa độ và xung lượng chỉ quan trọng đối với hạt vi mô.

2. Bó sóng và hệ thức bất định

Ta sẽ chứng minh rằng độ rộng của bó sóng $\psi_0(x)$ và độ rộng của biên độ $\phi(k)$ của nó không độc lập nhau và phụ thuộc tỉ lệ nghịch với nhau. Điều này liên quan trực tiếp đến hệ thức bất định Heisenberg (1.40). Để đơn giản ta chọn bó sóng có dạng Gauss như sau:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x}, \quad \phi(\mathrm{k}) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)/4}. \tag{1.41}$$

Như đã chỉ ở Hình 1.9, đồ thị $|\psi_0(x)|^2$ cực đại tại x=0, đồ thị $|\phi(k)|^2$ cực đại tại $k = k_0$. Ta định nghĩa nửa độ rộng Δx và Δk tương ứng với nửa cực đại của 2 đường cong này. Như vậy, khi x thay đổi từ 0 đến $\pm\Delta x$ và k thay đổi từ k_0 đến $k_0 \pm \Delta k$ thì các hàm $|\psi_0(x)|^2$ và $|\phi(k)|^2$ giảm một lượng $e^{-1/2}$:

$$\frac{|\psi(\pm\Delta x, 0)|^2}{|\psi(0,0)|^2} = e^{-1/2}, \quad \frac{|\phi(k_0 \pm \Delta k)|^2}{|\phi(k_0)|^2} = e^{-1/2}. \tag{1.42}$$

Kết hợp hệ thức trên với (1.41), ta được: $e^{-2\Delta x^2/a^2} = e^{-1/2} e^{-a^2\Delta k^2/2} = e^{-1/2}$, hay

$$\Delta x = \frac{a}{2},\ \Delta k = \frac{1}{a}. \tag{1.43}$$

Vì vậy

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}, \text{vì } \Delta k = \Delta p_x/\hbar \text{ nên } \Delta x \Delta p_x = \hbar/2. \tag{1.44}$$

Hệ thức này cho thấy rằng nếu độ rộng của bó sóng trong không gian tọa độ là bé thì trong không gian xung lượng độ rộng này lớn và ngược lại. So sánh

hệ thức này với hệ thức bất định Heisenberg (1.40) ta thấy rằng bó sóng dạng Gauss cho một đẳng thức mà không phải là bất đẳng thức. Thực ra, hệ thức (1.44) là giới hạn thấp nhất của bất đẳng thức Heisenberg (1.40). Tất cả các dạng bó sóng khác cho giá trị lớn hơn của tích $\Delta x \Delta p_x$. Như vậy có thể kết luận rằng giá trị của độ bất định của tọa độ và xung lượng phụ thuộc vào dạng của bó sóng, trong đó dạng bó sóng Gauss có giá trị thấp nhất.

7.3 CHUYỂN ĐỘNG CỦA BÓ SÓNG

Bây giờ ta sẽ khảo sát sự thay đổi của bó sóng theo thời gian $\Psi(x,t)$ khi biết bó sóng ban đầu $\Psi(x,0)$ hoặc biên độ $\phi(k)$. Muốn vậy, ta phải tính tích phân $\int \phi(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$ trong (1.37), trong đó ta phải xác định tần số ω và biên độ $\phi(k)$. Ta sẽ thấy rằng dạng của bó sóng phụ thuộc chủ yếu vào sự phụ thuộc của tần số vào số sóng ($\omega(k)$).

1. Sự truyền của bó sóng trong trường hợp không biến dạng

Ta xét trường hợp không tán sắc khi tần số $\omega = v_0 k$. Bó sóng (1.37) trở thành:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k)e^{ik(x-v_0 t)}dk. \qquad (1.45)$$

So sánh với biểu thức (1.38) ta được:

$$\Psi(x,t) = \psi_0(x - v_0 t); \qquad (1.46)$$

Từ (1.46) ta thấy dạng của bó sóng tại thời điểm t giống như tại thời điểm ban đầu. Như vậy bó sóng chuyển động với vận tốc không đổi mà không bị biến dạng.

Bây giờ ta xét trường hợp có sự tán sắc của môi trường, nghĩa là sóng có tần số khác nhau có vận tốc khác nhau. Giả sử rằng biên độ $\phi(k)$ cực đại tại $k = k_0$ thì $\phi(k) = g(k - k_0)$ khác không trong miền $\Delta k = k - k_0$. Thực hiện

khai triển Taylor tần số ω theo số sóng k tại lân cận của k_0, ta được:

$$\begin{aligned}\omega(k) &= \omega(k_0) + (k-k_0)\frac{d\omega(k)}{dk}\bigg|_{k=k_0} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2\frac{d^2\omega(k)}{dk^2}\bigg|_{k=k_0} + \cdots \\ &= \omega(k_0) + (k-k_0)v_g + (k-k_0)^2\alpha + \cdots,\end{aligned} \tag{1.47}$$

trong đó $v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0}$ và $\alpha = \frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}\Big|_{k=k_0}$.

Thay (1.47) vào (1.37) với $\phi(k) = g(k-k_0)$, ta được:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_0(x-v_{\rm ph}t)}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} g(k-k_0)e^{i(k-k_0)(x-v_{\rm g}t)}e^{-i(k-k_0)^2\alpha t+\cdots}dk, \tag{1.48}$$

trong đó $v_{\rm ph} = \omega(k)/k$ là vận tốc pha và $v_g = \omega(k)/dk$ là vận tốc nhóm. Vận tốc pha là vận tốc truyền pha của một sóng điều hòa đơn $e^{ik_0(x-v)_{ph}t}$, vận tốc nhóm là vận tốc chuyển động của nhóm các sóng tạo nên bó sóng.

Việc tính dạng của bó sóng $\Psi(x,t)$ ở biểu thức (1.48) phụ thuộc vào giới hạn các số hạng khai triển trong biểu thức (1.47). Nếu giới hạn ở số hạng tuyến tính $(k-k_0)v_gt$ ta sẽ có trường hợp phép gần đúng tuyến tính. Nếu giới hạn ở số hạng bậc hai $(k-k_0)^2\alpha t$ ta được phép gần đúng bậc hai.

a) Phép gần đúng tuyến tính: Bó sóng (1.48) trở thành:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_0(x-v_{\rm ph}t)}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k-k_0)e^{i(k-k_0)(x-v_{\rm g}t)}dk. \tag{1.49}$$

Biểu thức này được viết lại như sau:

$$\Psi(x,t) = e^{ik_0(x-v_{\rm ph}t)}\psi_0(x-v_{\rm g}t)e^{-ik_0(x-v_{\rm g}t)}, \tag{1.50}$$

trong đó ψ_0 là bó sóng ban đầu

$$\psi_0(x-v_{\rm g}t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(q)e^{i(x-v_gt)q+ik_0(x-v_gt)}dq, \tag{1.51}$$

trong đó ta đã đặt $q = k-k_0$. Biểu thức (1.50) cho ta điều kiện:

$$|\Psi(x,t)|^2 = |\psi_0(x-v_gt|^2 \tag{1.52}$$

Hệ thức (1.50) và (1.52) biểu diễn bó sóng có đỉnh chuyển động với vận tốc nhóm v_g, trong lúc đó các sóng thành phần dịch chuyển bên trong hình bao với vận tốc pha v_{ph}. Như vậy vận tốc nhóm đại diện cho vận tốc của hạt. Từ hệ thức (1.50) ta thấy rằng kích thước của bó sóng không thay đổi trong quá trình truyền sóng, nghĩa là bó sóng lan truyền trong không gian mà không bị biến dạng.

2. Sự truyền của bó sóng trong trường hợp biến dạng

Bây giờ ta giới hạn ở số hạng bậc hai, $(k-k_0)^2\alpha t$, trong hàm e mũ của biểu thức (1.48). Điều này dẫn đến

$$\Psi(x,t) = e^{ik_0(x-v_{ph}t)}f(x,t), \tag{1.53}$$

trong đó $f(x,t)$ biểu diễn hình bao của bó sóng, được cho bởi biểu thức:

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(q)e^{iq(x-v_g t)}e^{-iq^2\alpha t}dq, \tag{1.54}$$

với $q = k - k_0$.

Giả sử ta xét bó sóng Gauss có biên độ được cho bởi biểu thức:

$$\phi(k) = (a^2/2\pi)^{1/4}\exp[-a^2(k-k_0)^2/4],$$

độ rộng ban đầu của bó sóng là $\Delta x_0 = a/2$ và $\Delta k = \hbar/a$. Thay $\phi(k)$ vào (1.53), ta được

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{ik_0(x-v_{ph}t)}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[iq(x-v_g t) - \left(\frac{a^2}{4}+i\alpha t\right)q^2\right]dq. \tag{1.55}$$

Từ (1.55) ta tính được mật độ phân bố của bó sóng:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta\mathrm{x(t)}}\exp\left\{-\frac{(x-v_g t)^2}{2[\Delta x(t)]^2}\right\}, \tag{1.56}$$

trong đó $\Delta x(t)$ là độ rộng của bó sóng tại thời điểm t:

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2}\sqrt{1+\frac{16\alpha^2}{a^4}t^2} = \Delta x_0\sqrt{1+\frac{\alpha^2 t^2}{(\Delta x_0)^4}}. \tag{1.57}$$

Ta thấy độ rộng của bó sóng sau thời gian t tăng lên một thừa số $\sqrt{1+\alpha^2t^2/(\Delta x_0)^4}$ so với giá trị ban đầu $\Delta x_0 = a/2$.

Tóm lại, một hạt định xứ tại một nơi nào đó trong không gian được biểu diễn không phải bởi một sóng De Broglie đơn giản có tần số và bước sóng xác định mà bằng một bó sóng. Hình bao của bó sóng di chuyển với vận tốc nhóm. Vận tốc của hạt thì bằng vận tốc nhóm của bó sóng tương ứng với hạt đó.

§ 8 TÓM TẮT CHƯƠNG 1

- Sự khủng hoảng ở miền tử ngoại khi nghiên cứu bức xạ nhiệt dẫn đến sự ra đời của thuyết lượng tử năng lượng của Planck. Đây là lý thuyết đầu tiên của vật lý đề cập đến tính gián đoạn của các đại lượng động lực

- Thuyết lượng tử ánh sáng của Einstein ra đời nhằm giải quyết sự bế tắc của vật lý học cổ điển về việc giải thích hiện tượng quang điện, trong đó khái niệm hạt ánh sáng (photon) đóng vai trò rất quan trọng trong nghiên cứu tương tác bức xạ với vật chất.

- Việc nghiên cứu bức xạ nhiệt, hiệu ứng quang điện và hiệu ứng Compton đưa đến việc đưa ra khái niệm lưỡng tính sóng-hạt của sóng điện từ.

- Tính chất sóng của hạt vật chất được đặc trưng bởi một hàm sóng $\Psi(\vec{r}, t)$. Hàm sóng này phải thoả mãn các điều kiện tiêu chuẩn, đó là đơn trị, liên tục và giới nội và thường được chuẩn hóa.

- Một hạt định xứ được biểu diễn bằng một bó sóng, là chồng chất của nhiều sóng đơn lẻ có bước sóng gần nhau. Khái niệm bó sóng liên quan đến độ bất định trong phép đo tọa độ và vận tốc của hạt vi mô, được phát biểu bởi Heisenberg năm 1927.

§ 9 BÀI TẬP CHƯƠNG 1

1. Dùng công thức De Broglie hãy tính bước sóng kết hợp với:
   a) Viên bi khối lượng 0,01 kg chuyển động với vận tốc 10 m/s
   b) Hạt electron có năng lượng 1 MeV
   c) Electron có vận tốc 10^8 cm/s

2. Một hạt khối lượng m bị buộc phải chuyển động trên một đoạn thẳng dài L. Dựa vào tính chất sóng của hạt, chứng minh rằng hạt đó chỉ có thể có các giá trị năng lượng gián đoạn và tính các năng lượng đó.

3. Trạng thái của một hạt được mô tả bởi hàm sóng
   $$\psi(x) = A\exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} + ikx\right] \quad \text{trong đó} A, a, k \quad \text{là các hằng số.}$$
   a) Hãy xác định A từ điều kiện chuẩn hoá
   b) Hãy xác định x để mật độ xác suất tìm hạt có giá trị lớn nhất
   c) Tìm xác suất để hạt nằm trong khoảng từ $-a$ đến $+a$ trên trục x. Cho biết tích phân: $\int_0^1 e^{-X^2} dX = 0,42\sqrt{\pi}$.

4. Tìm biến đổi Fourier đối với
   $$\phi(k) = \begin{cases} A(a - |k|), & |k| \leq a \\ 0, & |k| > a, \end{cases}$$
   trong đó a là hằng số dương, A là thừa số chuẩn hoá cần phải xác định.

5. Tìm dạng $\Psi(x,0)$ của bó sóng tương ứng với sóng có dạng $\phi(k) = A\exp[-a^2(k-k_0)^2/4]$, trong đó A là hệ số chuẩn hoá cần phải tìm. Tính xác suất tìm hạt trong miền $-a/2 \leq x \leq a/2$.

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. a) Dùng công thức $\lambda = h/p = h/mv$, tính ra $\lambda = 6,625.10^{-33}$m.

   b) Dùng các công thức của thuyết tương đối:

$$E^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2 \text{ và } E = m_0c^2 + T,$$

   ta suy ra

$$p = (T/c)\sqrt{1 + \frac{2m_0c^2}{T}} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{2m_0T}\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{T}{2m_0c^2}}},$$

   tính ra ta được $\lambda = 8,7.10^{-13}$ m.

   c) Vận tốc của electron $v = 10^8$ cm/s $= 10^6$ m/s $\ll$ c $= 3.10^8$ m/s. Đây là trường hợp phi tương đối tính. Tính ra, ta được: $\lambda = 7,27.10^{-10}$m

2. a) Hàm sóng tương ứng với hạt phải triệt tiêu khi $x \leq 0$ và $x \geq L$.

   b) ở bên trong đoạn [0, L] bước sóng phải thỏa mãn điều kiện: $L = n\lambda/2$.

   c) Từ công thức De Broglie: $\lambda = h/p \Rightarrow p = h/\lambda = nh/2L$

   d) Coi hạt ở trong miền đang xét không chịu tác dụng của ngoại lực. Năng lượng của hạt chính là động năng:

$$E = T = \frac{1}{2}mv^2 = p^2/2m \Rightarrow E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2};\ n = 1, 2, 3...$$

3. a) Dùng điều kiện chuẩn hoá $\int\limits_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi dx = 1$. Hay:

$$|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2}dx = 1$$

   và tích phân Poisson

$$I_{2n} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} x^{2n}e^{-\alpha x^2}dx \Rightarrow I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},$$

tính ra, ta được: $A = \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{\pi}}}$.

b) Mật độ xác suất tìm hạt $\rho = |\psi|^2 = A^2 e^{(-x^2/a^2)}$. Khảo sát cực đại của hàm số $\rho(x)$ bằng cách lấy đạo hàm theo x rồi cho bằng 0 ($\frac{d\rho}{dx} = 0$), ta thấy ρ có cực đại khi x = 0.

c) Xác suất tìm hạt trong khoảng [-a, +a] là:

$$W = |A|^2 \int\limits_{-a}^{+a} e^{-x^2/a^2} dx.$$

Dùng phương pháp đổi biến số: đặt $X = x/a$, lúc đó tích phân trên trở thành:

$$W = a|A|^2 \int_{-1}^{+1} e^{-X^2} dX = 2a|A|^2 \int_0^{+1} e^{-X^2} dX$$

Sử dụng tích phân: $\int\limits_0^1 e^{-X^2} dX = 0,42\sqrt{\pi}$, ta tính ra ta được: $W = 0,84$.

4. Sử dụng điều kiện chuẩn hoá: $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk = 1$. Tính ra ta được: $A = \sqrt{3/(2a^3)}$. Biến đổi Fourier của $\phi(k)$ là:

$$\begin{aligned}
\psi_0(x) &= \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\tfrac{3}{2a^3}} \left[\int\limits_{-a}^{0} (a+k) e^{ikx} dk + \int\limits_{0}^{a} (a-k) e^{ikx} dk \right] \\
&= \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\tfrac{3}{2a^3}} \left[\int\limits_{-a}^{0} k e^{ikx} dk - \int\limits_{0}^{a} k e^{ikx} dk + a \int\limits_{-a}^{a} e^{ikx} dk \right].
\end{aligned}$$

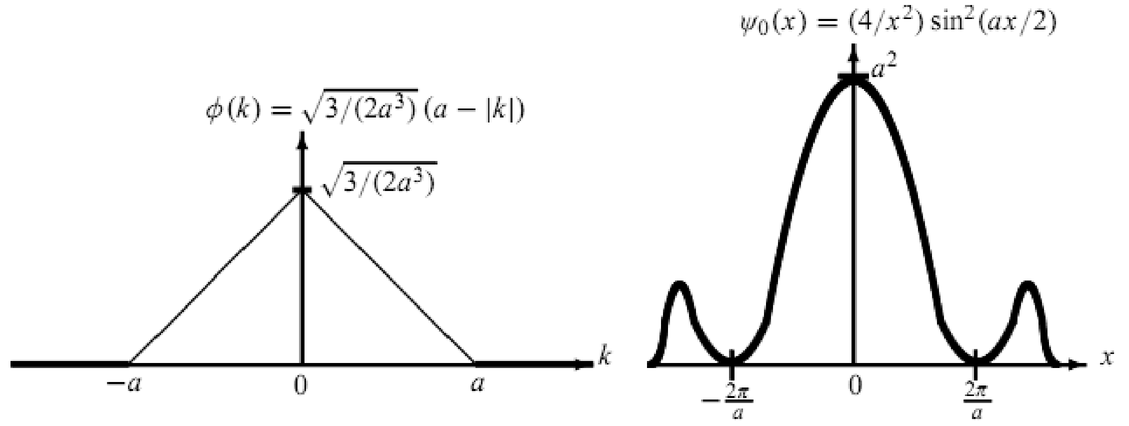
Tính ra ta được:

$$\psi_0(x) = \frac{4}{x^2} \sin^2\left(\frac{ax}{2}\right).$$

Đồ thị của hàm $\phi(k)$ và $\psi_0(x)$ được biểu diễn ở hình 1.10

5. Điều kiện chuẩn hoá:

$$1 = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\phi(k)|^2 dk = |A|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2} dk.$$



Hình 1.10: Đồ thị của hàm $\phi(k)$ và $\psi_0(x)$.

Tính tích phân trên bằng cách đặt $z = k - k_0$ và sử dụng tích phân Poisson, ta được: $A = (a^2/2\pi)^{1/4}$. Bó sóng tương ứng với hàm $\phi(k)$ chuẩn hoá là:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + ikx} dk.$$

Để áp dụng được tích phân Poisson cho trường hợp này, ta biến đổi số hạng ở hàm e mũ như sau:

$$-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2 + ikx = \left[\frac{a}{2}(k-k_0) - \frac{ix}{a} \right]^2 - \frac{x^2}{a^2} + ikx.$$

Ta sẽ tính được:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e^{ik_0 x},$$

trong đó e^{ik_0x} là pha của $\psi_0(x)$.

Xác suất tìm hạt trong miền $-a/2 \leq x \leq a/2$ là:

$$W = \int_{-a/2}^{+a/2} |\psi_0(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-a/2}^{+a/2} e^{-2x^2/a^2} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-1}^{+1} e^{-X^2/2} dX \simeq \frac{2}{3}.$$

Chương 2
Cơ sở toán học của cơ học lượng tử

§ **MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG**

• Mục tiêu của chương này là khảo sát các công cụ toán học cần thiết cho việc nghiên cứu cơ học lượng tử. Việc khảo sát này chỉ giới hạn ở những khái niệm cơ bản cần thiết để xây dựng nên cơ lượng tử, trong đó toán tử Hermite và không gian Hilbert là hai công cụ quan trong nhất. Ngoài ra, một số kiến thức cơ sở về xác suất và trị trung bình cũng được đề cập để làm cơ sở cho việc khảo sát tính chất thống kê trong cơ lượng tử.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ nắm được khái niệm không gian Hilbert và toán tử Hermite; giải được các bài toán liên quan đến phương trình trị riêng của toán tử, tính được các giao hoán tử cơ bản trong cơ học lượng tử.

§ 1 XÁC SUẤT VÀ TRỊ TRUNG BÌNH

1.1 BIẾN CỐ NGẪU NHIÊN VÀ XÁC SUẤT

Một biến cố ngẫu nhiên (random event) được định nghĩa là một hiện tượng, một sự kiện có thể xảy ra hoặc không xảy ra. Chẳng hạn như việc tìm thấy phân tử A trong một bình chứa khí tại một thời điểm nào đó là một biến cố ngẫu nhiên. Các quan sát thực nghiệm liên quan đến các biến cố ngẫu nhiên được gọi là các phép thử (trial). Người ta định nghĩa xác suất của một biến cố ngẫu nhiên là tỉ số giữa số lần thử n mà biến cố đã cho xuất hiện trên tổng số

lần thử N, với N đủ lớn:

$$w(A) = \frac{n}{N} \qquad \text{khi N đủ lớn.} \tag{2.1}$$

Về mặt toán học, ta có thể viết

$$w(A) = \lim_{N\to\infty} \frac{n}{N}. \tag{2.2}$$

Theo định nghĩa (2.2), $w(A)$ phải thỏa mãn điều kiện:

$$0 \leq w(A) \leq 1, \tag{2.3}$$

trong đó khi $w = 0$ thì biến cố không thể xảy ra, khi $w = 1$ thì biến cố chắc chắn xảy ra.

1.2 ĐẠI LƯỢNG NGẪU NHIÊN

Một đại lượng có thể lấy các giá trị với các xác suất nhất định thì được gọi là đại lượng ngẫu nhiên hay biến số ngẫu nhiên (random variable). Các đại lượng ngẫu nhiên có thể có giá trị gián đoạn hoặc liên tục.

+ Trường hợp đại lượng A có giá trị gián đoạn thì xác suất để khi đo A ta được một giá trị a_k nào đó là

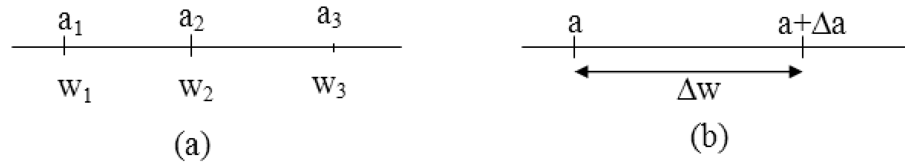
$$w_k(a_k) = \lim_{N\to\infty} \frac{n_k}{N}, \tag{2.4}$$

trong đó n_k số lần đo được giá trị a_k, N là tổng số lần đo.

+ Trong trường hợp đại lượng ngẫu nhiên A có giá trị liên tục thì ta chỉ nói đến mật độ xác suất để đại lượng A có một giá trị nhất định a nào đó, với định nghĩa như sau:

$$\rho(a) = \lim_{\Delta a\to 0} \frac{\Delta w}{\Delta a} = \frac{dw}{da}, \tag{2.5}$$

trong đó Δw là xác suất để A có giá trị trong khoảng từ a đến $a + \Delta a$.



Hình 2.1: Minh hoạ về xác suất (a) và mật độ xác suất (b).

1.3 TRỊ TRUNG BÌNH TRONG PHÉP ĐO MỘT ĐẠI LƯỢNG NGẪU NHIÊN

Giả sử biến ngẫu nhiên A có thể có:

- Giá trị a_1 với xác suất w_1 (giá trị a_1 xuất hiện n_1 lần trong N lần thử),
- Giá trị a_2 với xác suất w_2 (giá trị a_2 xuất hiện n_2 lần trong N lần thử),
- Giá trị a_k với xác suất w_k (giá trị a_k xuất hiện n_k lần trong N lần thử).

Ta định nghĩa giá trị trung bình trong phép đo đại lượng A là:

$$\overline{A} = \frac{a_1 n_1 + a_2 n_2 + a_3 n_3 + \dots}{N} \tag{2.6}$$

Khi $N \to \infty$ thì theo định nghĩa ở (2.4), (2.6) trở thành:

$$\overline{A} = \sum_{k=1}^{N} a_k w_k. \tag{2.7}$$

Nếu A có giá trị liên tục thì:

$$\overline{A} = \int_a a\rho(a)da. \tag{2.8}$$

Tích phân lấy trên toàn bộ miền biến thiên giá trị của A.

Liên quan đến trị trung bình, người ta còn định nghĩa trị trung bình của bình phương của một biến ngẫu nhiên (trị toàn phương trung bình) như sau:

$$\overline{A^2} = \sum_{k=1}^{N} a_k^2 w_k. \tag{2.9}$$

Trong trường hợp A có giá trị liên tục thì:

$$\overline{A^2} = \int_a a^2 \rho(a) da. \tag{2.10}$$

Một cách tổng quát

$$\overline{A^n} = \sum_{k=1}^{N} a_k^n w_k, \text{ hoặc } \overline{A^n} = \int_a a^n \rho(a) da. \tag{2.11}$$

1.4 ĐỘ LỆCH RA KHỎI TRỊ TRUNG BÌNH

Độ lệch ra khỏi giá trị trung bình trong phép đo một đại lượng ngẫu nhiên A được định nghĩa như sau:

$$(\Delta A)_k = a_k - \bar{A} \text{ đối với trường hợp A có giá trị gián đoạn}$$
$$\Delta A = a - \bar{A} \text{ đối với trường hợp A có giá trị liên tục}$$

Như vậy, ta thấy độ lệch ra khỏi giá trị trung bình có thể dương, âm hoặc bằng không. Khi $(\Delta A)_k > 0$ ta nói giá trị đo được a_k lớn hơn giá trị trung bình, ngược lại khi $(\Delta A)_k < 0$ ta nói giá trị đo được a_k nhỏ hơn giá trị trung bình. Trường hợp $(\Delta A)_k = 0$ ứng với khi đo A có giá trị chính xác $a_k = \bar{A}$. Điều cần lưu ý là nếu lấy giá trị trung bình của độ lệch thì ta được giá trị không (0). Thật vậy, ta xét trường hợp phổ liên tục:

$$\overline{\Delta A} = \overline{a - \bar{A}} = \int_a \rho(a)(a - \bar{A}) da = \int_a \rho(a) da - \overline{A} \int_a \rho(a) da = \bar{A} - \bar{A} = 0$$

Bạn đọc có thể chứng minh tương tự trong trường hợp phổ gián đoạn.

1.5 TRỊ TRUNG BÌNH CỦA BÌNH PHƯƠNG ĐỘ LỆCH

Trị trung bình của bình phương độ lệch hay thăng giáng toàn phương trung bình (còn gọi là phương sai) trong phép đo đại lượng ngẫu nhiên A được định

nghĩa như sau (xét trường hợp phổ gián đoạn):

$$\begin{aligned}\overline{(\Delta A)^2} &= \overline{(a_k - \bar{A})^2} = \sum_k \left(a_k^2 - 2a_k\bar{A} + (\bar{A})^2\right)w_k \\ &= \sum_k a_k^2 w_k - 2\bar{A}\sum_k a_k w_k + (\bar{A})^2\sum_k w_k \\ &= \overline{A^2} - 2(\bar{A})^2 + (\bar{A})^2 = \overline{A^2} - (\bar{A})^2 \end{aligned} \tag{2.12}$$

Bạn đọc có thể chứng minh tương tự trong trường hợp phổ liên tục.

§ 2 KHÔNG GIAN HILBERT

2.1 KHÔNG GIAN TUYẾN TÍNH

Không gian tuyến tính (còn gọi là không gian vectơ) bao gồm tập hợp X mà các phần tử là các vectơ $\psi,\ \phi,\ \chi, \ldots$ và trường số K của các số vô hướng $\alpha,\ \beta,\ \gamma, \ldots$ trong đó có trang bị hai phép tính:

a) Phép cộng vectơ với vectơ:

Tương ứng với hai vectơ ψ và ϕ của tập X là một phần tử của X được gọi là tổng của ψ và ϕ. Phép cộng toán tử thỏa mãn các tính chất sau:

- $\psi + \phi = \phi + \psi$ (tính chất giao hoán),
- $(\psi + \phi) + \chi = \psi + (\phi + \chi)$ (tính chất kết hợp),
- $\psi + 0 = \psi$ (phần tử trung hoà),
- $\psi + (-\psi) = 0$ (phần tử đối).

b) Phép nhân vectơ với một số vô hướng:

Tương ứng với một phần tử ψ của tập V và một số α thuộc một trường số K là một phần tử $\alpha\psi$ cũng thuộc tập hợp V. Phép nhân có các tính chất sau:

- Phân bố đối với phép cộng:
  $\alpha(\psi + \phi) = \alpha\psi + \alpha\phi;\ \ (\alpha + \beta)\psi = \alpha\psi + \beta\psi,$

- Kết hợp đối với phép nhân với số vô hướng: $\alpha(\beta\psi) = (\alpha\beta)\psi)$,
- Đối với mỗi ψ tồn tại một số vô hướng bằng đơn vị và một số vô hướng bằng không sao cho: $1\psi = \psi$ và $o\psi = \psi o = o$.

Như vậy, một tập V cùng với một trường số K có trang bị hai phép toán thoả mãn các tính chất như trên thì tạo thành một không gian tuyến tính. Nếu K là trường số thực thì ta có không gian tuyến tính thực, ngược lại nếu K là trường số phức ta có không gian tuyến tính phức.

2.2 KHÔNG GIAN HILBERT

Không gian Hilbert là một không gian tuyến tính phức, trong đó có trang bị một tích vô hướng thỏa mãn các tính chất sau:

$$\begin{aligned} &1.\quad (\psi, \phi)^* = (\phi, \psi), \\ &2.\quad (\psi, \phi + \chi) = (\psi, \phi) + (\psi, \chi), \\ &3.\quad (\alpha\psi, \beta\phi) = \alpha^*\beta(\psi, \phi), \\ &4.\quad (\psi, \psi) \geq 0 \text{ và chỉ bằng không khi } \psi = 0. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Tính chất 4 trong (2.13) được gọi là tính chất xác định dương của tích vô hướng.

2.3 KÝ HIỆU DIRAC

Như đã trình bày ở Chương I, tính chất sóng của hạt vi mô được mô tả bởi một hàm sóng. Theo một tiên đề sẽ trình bày ở Chương III thì hàm sóng này là một phần tử của không gian Hilbert và thường được gọi là vectơ trạng thái.

Dirac đã đưa ra các ký hiệu sau:

- Vectơ trạng thái ψ được ký hiệu bằng $|\psi\rangle$ và được gọi là vectơ *ket*, hoặc đơn giản là *ket*. Ket là các phần tử của không gian Hilbert $\mathcal{H}$. Như vậy, tương ứng với một ket $|\psi\rangle$ là một bra $\langle\psi|$ và ngược lại: $a|\psi\rangle \leftrightarrow a^*\langle\psi|$.

- Theo đại số tuyến tính thì tương ứng với không gian Hilbert $\mathcal{H}$ là không gian Hilbert đối ngẫu $\mathcal{H}_d$. Các phần tử trong không gian đối ngẫu này được gọi là *bra* và lý hiệu là $\langle\psi|$. Cần chú ý rằng nếu $|\psi\rangle$ và $|\phi\rangle$ đều là phần tử của cùng một không gian Hilbert thì tích $|\psi\rangle|\phi\rangle$ và $\langle\psi|\langle\phi|$ không tồn tại. Tuy nhiên, nếu $|\psi\rangle$ và $|\phi\rangle$ thuộc về hai không gian Hilbert khác nhau thì tích $\langle\psi|\langle\phi|$ được viết dưới dạng $\langle\psi|\otimes\langle\phi|$, biểu diễn một tích tenxơ của $|\psi\rangle$ và $|\phi\rangle$.

Từ ký hiệu của Dirac về *bra* và *ket*, tích vô hướng trong không gian Hilbert được ký hiệu dưới dạng *bra-ket* như sau: $(\psi,\phi)\to\langle\psi|\phi\rangle$. Trong trường hợp hàm sóng phụ thuộc toạ độ thì tích vô hướng có dạng:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_V \psi^*(\vec{r},t)\phi(\vec{r},t)dV. \tag{2.14}$$

Tích vô hướng này thoả mãn các tính chất như ở (2.13).

Ta có thể giải thích ý nghĩa vật lý của tích vô hướng như sau: Tương tự như tích vô hướng của các vectơ trong không gian vectơ thông thường, trong đó $\vec{A}.\vec{B}$ biểu diễn hình chiếu của vectơ $\vec{B}$ lên vectơ $\vec{A}$, tích vô hướng $\langle\psi|\phi\rangle$ cũng biểu diễn hình chiếu của ϕ lên ψ.

Nếu tích phân (2.14) phân kỳ thì tích vô hướng $\langle\psi|\phi\rangle$ không tồn tại. Như vậy, ta phải chọn lựa hàm sao cho tích vô hướng hữu hạn. Một hàm như thế được gọi là hàm bình phương khả tích. Hàm trạng thái mà chúng ta đang xét là hàm bình phương khả tích thoả mãn điều kiện này nhờ điều kiện chuẩn hoá:

$$\langle\psi(\vec{r},t)|\psi(\vec{r},t)\rangle = \int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1. \tag{2.15}$$

2.4 MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA TÍCH VÔ HƯỚNG

1. $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$

2. Đối với một vectơ $|\psi\rangle$ bất kỳ thuộc không gian Hilbert, chuẩn (norm) $\langle\psi|\psi\rangle$ là thực và dương. Chuẩn $\langle\psi|\psi\rangle$ bằng không khi và chỉ khi $|\psi\rangle = 0$. Nếu $|\psi\rangle$ là chuẩn hóa thì $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

3. Bất đẳng thức Schwarz: Với hai vectơ bất kỳ của không gian Hilbert, ta có thể chứng minh rằng:

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle. \tag{2.16}$$

Nếu $|\psi\rangle$ và $|\phi\rangle$ phụ thuộc tuyến tính, nghĩa là $|\psi\rangle = \alpha|\phi\rangle$, với α là một vô hướng, thì bất đẳng thức này trở thành đẳng thức. Bất đẳng thức (2.16) tương tự như hệ thức sau đây trong không gian Euclide thực: $|\vec{A}.\vec{B}|^2 \leq |\vec{A}|^2|\vec{B}|^2$.

4. Bất đẳng thức tam giác: Với hai vectơ bất kỳ của không gian Hilbert, ta có thể chứng minh rằng:

$$\sqrt{\langle\psi+\phi|\psi+\phi\rangle} \leq \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} + \sqrt{\langle\phi|\phi\rangle}. \tag{2.17}$$

Nếu $|\psi\rangle$ và $|\phi\rangle$ phụ thuộc tuyến tính, nghĩa là $|\psi\rangle = \alpha|\phi\rangle$, với α là một vô hướng, thì bất đẳng thức này trở thành đẳng thức. Bất đẳng thức (2.17) tương tự như hệ thức sau đây trong không gian Euclide thực: $|\vec{A}+\vec{B}| \leq |\vec{A}| + |\vec{B}|$.

Ví dụ 2.1:

Xét các trạng thái $|\psi\rangle = 3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle$ và $|\chi\rangle = -|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle$, trong đó ϕ_1 và ϕ_2 thoả mãn điều kiện trực chuẩn.

a) Tính $|\psi+\chi\rangle$ và $\langle\psi+\chi|$.

b) Tính tích vô hướng $\langle\psi|\chi\rangle$ và $\langle\chi|\psi\rangle$

Lời giải

$$\begin{aligned} a)\quad |\psi+\chi\rangle &= |\psi\rangle + |\chi\rangle = (3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle) + (-|\phi_1\rangle + 2i|\phi\rangle) \\ &= (-1+3i)|\phi_1\rangle - 5i|\phi_2\rangle. \end{aligned}$$

Từ biểu thức này ta được

$$\langle\psi+\chi| = (-1+3i)^*\langle\phi_1| + (-5i)^*\langle\phi_2| = (-1-3i)\langle\phi_1| + 5i\langle\phi_2|.$$

b) Vì $\langle\phi_1|\phi_1\rangle$=$\langle\phi_2|\phi_2\rangle = 1$, $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \langle\phi_2|\phi_1\rangle = 0$, nên tích vô hướng là:

$$\begin{aligned}\langle\psi|\chi\rangle &= (-3i\langle\phi_1| + 7i\langle\phi_2|)(-|\phi_1\rangle + 2i|\phi_2\rangle)\\ &= (-3i)(-1)\langle\phi_1|\phi_1\rangle + (7i)(2i)\langle\phi_2|\phi_2\rangle = -14 + 3i,\\ \langle\chi|\psi\rangle &= (-\langle\phi_1| - 2i\langle\phi_2|)(3i|\phi_1\rangle - 7i|\phi_2\rangle)\\ &= (3i)(-1)\langle\phi_1|\phi_1\rangle + (-7i)(-2i)\langle\phi_2|\phi_2\rangle = -14 - 3i.\end{aligned}$$

Ta thấy rằng $\langle\psi|\chi\rangle$ chính là liên hiệp phức của $\langle\chi|\psi\rangle$.

2.5 CHIỀU VÀ CƠ SỞ CỦA KHÔNG GIAN HILBERT

1. Độc lập tuyến tính và phụ thuộc tuyến tính

Ta gọi tập N vectơ khác không $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_N$ là độc lập tuyến tính nếu và chỉ nếu nghiệm của phương trình

$$\sum_{i=1}^{N} a_i\phi_i = 0 \tag{2.18}$$

là $a_1 = a_2 = \ldots a_N = 0$. Nếu tồn tại một tập các số vô hướng khác không sao cho một trong các vectơ của tập N (chẳng hạn ϕ_n) có thể biểu diễn bằng tổ hợp tuyến tính của các vectơ khác:

$$\phi_n = \sum_{i=1}^{n-1} a_i\phi_i + \sum_{i=n+1}^{N} a_i\phi_i, \tag{2.19}$$

thì tập $\{\phi_i\}$ được gọi là phụ thuộc tuyến tính.

2. Chiều của không gian

Chiều của không gian là số tối đa các vectơ độc lập tuyến tính thuộc không gian đó. Nếu số tố đa này là N thì ta nói không gian có N chiều. Trong không gian N chiều mọi vectơ ψ bất kỳ có thể khai triển thành tổ hợp tuyến tính:

$$\psi = \sum_{i=1}^{N} a_i\phi_i. \tag{2.20}$$

3. Cơ sở của không gian

Ta định nghĩa cơ sở của không gian là tập hợp các vectơ độc lập tuyến tính thuộc không gian đó. Ta ký hiệu tập các vectơ cơ sở $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_N$ là $\{\phi_i\}$. Để thuận tiện ta chọn các vectơ cơ sở thoả mãn các điều kiện sau:

- Điều kiện trực chuẩn: Các vectơ cơ sở trực giao với nhau, nghĩa là tích vô hướng của chúng bằng không: $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = 0$.

- Điều kiện chuẩn hoá: Mỗi vectơ cơ sở có chuẩn bằng đơn vị: $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$.

Hai điều kiện này được gộp lại thành một và được gọi là điều kiện trực chuẩn, thoả mãn hệ thức:

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}, \tag{2.21}$$

trong đó δ_{ij} là ký hiệu Kronecker, được định nghĩa như sau:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{khi } i = j \\ 0 & \text{khi } i \neq j \end{cases} \tag{2.22}$$

Ví dụ 2.2:

Tập các vectơ sau đây là độc lập tuyến tính hay phụ thuộc tuyến tính?

$$\begin{aligned} &(a) \quad \vec{A} = (3,0,0), \vec{B} = (0,-2,0), \vec{C} = (0,0,-1) \\ &(b) \quad \vec{A} = (6,-9,0), \vec{B} = (-2,3,0). \end{aligned} \tag{2.23}$$

Lời giải

(a) Ba vectơ $\vec{A} = (3,0,0), \vec{B} = (0,-2,0), \vec{C} = (0,0,-1)$ là độc lập tuyến tính, vì

$$a_1\vec{A} + a_2\vec{B} + a_3\vec{C} = 0 \Rightarrow 3a_1\vec{i} - 2a_2\vec{j} - a_3\vec{k} = 0$$

nên $3a_1 = 0, \ \ -2a_2 = 0, \ \ -a_3 = 0$, suy ra $a_1 = a_2 = a_3 = 0$.

(b) Hai vectơ $\vec{A} = (6,-9,0), \vec{B} = (-2,3,0)$ là phụ thuộc tuyến tính, vì nghiệm của $a_1\vec{A} + a_2\vec{B} = 0 \Rightarrow (6a_1 - 2a_2)\vec{i} + (-9a_1 + 3a_2)\vec{j} = 0$ là $a_1 = a_2/3$. Như vậy $\vec{A} = -3\vec{B}$.

§ 3 TOÁN TỬ TRONG CƠ HỌC LƯỢNG TỬ

3.1 KHÁI NIỆM TOÁN TỬ

Trong toán học, ta định nghĩa toán tử là một phép toán tác dụng lên một hàm nào đó và biến hàm này thành hàm khác. Ta gọi $\hat{A}$ là toán tử tác dụng lên hàm ψ và biến hàm này thành hàm ϕ, điều này được biểu diễn bằng phương trình:

$$\hat{A}\psi = \phi. \tag{2.24}$$

Nếu sử dụng ký hiệu Dirac thì ta có thể viết:

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle. \tag{2.25}$$

Trong giáo trình này toán tử được ký hiệu bằng dấu ($\wedge$) ở trên đầu. Nếu phép toán là phép nhân thông thường thì không cần dấu ($\wedge$), ví dụ: $\phi(x) = \hat{x}\psi(x) \equiv x\psi(x)$.

3.2 CÁC PHÉP TOÁN TRÊN TOÁN TỬ

1. Tổng của hai toán tử

Ta gọi $\hat{S}$ là tổng của toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ nếu ta có:

$$\hat{S}\psi = (\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \tag{2.26}$$

2. Tích của hai toán tử và Giao hoán tử

Toán tử $\hat{\Pi}$ được gọi là tích của 2 toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ khi ta có:

$$\hat{\Pi}\psi = (\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) \tag{2.27}$$

Phép nhân toán tử có tính kết hợp, nghĩa là: $\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}$. Nói chung tích của 2 toán tử không có tính giao hoán, nghĩa là trong phép nhân toán tử thứ tự của toán tử là quan trọng, tích $\hat{A}\hat{B}\psi$ không nhất thiết phải bằng $\hat{B}\hat{A}\psi$. Tuy nhiên, ta chú ý đến một trường hợp riêng khi $(\hat{A}\hat{B})\psi = (\hat{B}\hat{A})\psi$ nghĩa là

$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 0$. Lúc đó ta nói hai toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ giao hoán với nhau. Ta ký hiệu:

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [\hat{A}, \hat{B}] \tag{2.28}$$

và được gọi là giao hoán tử của $\hat{A}$ và $\hat{B}$. Khi $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ thì $\hat{A}$ và $\hat{B}$ không giao hoán, ngược lại khi $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ thì $\hat{A}$ và $\hat{B}$ giao hoán.

Có thể chứng minh các tính chất sau của giao hoán tử $[\hat{A}, \hat{B}]$:

(1) Phản đối xứng: $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$,

(2) Giao hoán với một số vô hướng a: $[\hat{A}, a] = 0$,

(3) Phân phối đối với phép cộng: $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$,

(4) Phân phối đối với phép nhân: $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$,

(5) Đồng nhất Jacobi: $[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$.

Ví dụ 3.1:

Toán tử $\hat{A} = x$ và $\hat{B} = \dfrac{d}{dx}$ có giao hoán không?

Lời giải:

+ Ta lần lượt cho tích $\hat{A}\hat{B}$ rồi $\hat{B}\hat{A}$ tác dụng lên hàm $\psi(x)$:

$\hat{A}\hat{B}\psi(x) = x\dfrac{d\psi(x)}{dx}$,

$\hat{B}\hat{A}\psi(x) = \dfrac{d}{dx}(x\psi(x)) = \psi(x) + x\dfrac{d\psi(x)}{dx}$.

Trừ hai biểu thức này vế theo vế ta được:

$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi(x) = x\dfrac{d\psi(x)}{dx} - \left(\psi(x) + x\dfrac{d\psi(x)}{dx}\right) = -\psi(x)$.

Như vậy: $[\hat{A}, \hat{B}] = -1$, điều đó có nghĩa là 2 toán tử x và $\frac{d}{dx}$ không giao hoán.

3.3 HÀM RIÊNG VÀ TRỊ RIÊNG CỦA TOÁN TỬ

Nếu tác dụng của toán tử $\hat{A}$ lên hàm ψ chỉ đơn giản là phép nhân hàm này cho một số vô hướng a:

$$\hat{A}\psi = a\psi. \tag{2.29}$$

Lúc đó ta nói rằng ψ là hàm riêng của toán tử $\hat{A}$, còn a là trị riêng của $\hat{A}$. Tập hợp các trị riêng của $\hat{A}$ được gọi là phổ trị riêng. Phương trình (2.29) được gọi

là phương trình cho trị riêng và hàm riêng của toán tử hay gọi tắt là phương trình trị riêng. Ta phân biệt hai trường hợp:

a) Phổ trị riêng của $\hat{A}$ là gián đoạn, nghĩa là có các giá trị khả dĩ a_1, a_2 $\ldots a_N$, lúc đó phương trình (2.29) có thể viết như sau:

$$\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i, \text{ chỉ số } i \text{ lấy một trong các giá trị 1, 2, 3....}\ldots, \text{N} \tag{2.30}$$

b) Phổ trị riêng của $\hat{A}$ là liên tục, nghĩa là a có giá trị biến thiên liên tục, lúc đó phương trình (2.29) trở thành:

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a. \tag{2.31}$$

Trong trường hợp này ta nói hàm riêng phụ thuộc vào trị riêng như một thông số.

Ví dụ 3.2:

a) Giả sử rằng f(x) và g(x) là hai hàm riêng của toán tử $\hat{A}$ với trị riêng a. Chứng tỏ rằng một tổ hợp tuyến tính bất kỳ của f(x) và g(x) cũng là hàm riêng của $\hat{A}$ với cùng trị riêng a.

b) Kiểm tra rằng f(x) = exp(x) và g(x) = exp(-x) là hàm riêng của toán tử d^2/dx^2 với cùng một trị riêng. Hãy xây dựng hai tổ hợp tuyến tính của f và g là hàm trực giao trong khoảng (-1,1).

Lời giải:

a) Giả sử: $\hat{A}f(x) = af(x)$ và $\hat{A}g(x) = ag(x)$. Đặt $h(x) = \alpha f(x) + \beta g(x)$, ta được

$$\hat{A}h(x) = \hat{A}(\alpha f + \beta g) = \alpha(\hat{A}f) + \beta(\hat{A}g) = \alpha(af) + \beta(ag) = a(\alpha f + \beta g) = ah.$$

b) Ta có:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f}{dx^2} &= \frac{d^2}{dx^2}(e^x) = \frac{d}{dx}(e^x) = e^x = f = 1.f, \\ \frac{d^2 g}{dx^2} &= \frac{d^2}{dx^2}(e^{-x}) = \frac{d}{dx}(e^{-x}) = e^{-x} = g = 1.g. \end{aligned}$$

Như vậy cả hai hàm $\exp(x)$ và $\exp(-x)$ đều là hàm riêng của toán tử d^2/dx^2 với trị riêng đều bằng 1. Tổ hợp tuyến tính trực giao đơn giản nhất là:

$$\sinh x = \frac{1}{2}(e^x - e^{-x}) = \frac{1}{2}(f - g) \quad \text{và} \quad \cosh x = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x}) = \frac{1}{2}(f + g).$$

3.4 SỰ SUY BIẾN CỦA TRỊ RIÊNG

Ta khảo sát một trường hợp quan trọng khi xét bài toán trị riêng của toán tử. Nếu một hàm riêng chỉ ứng với một trị riêng thì ta nói toán tử $\hat{A}$ có trị riêng không suy biến. Trường hợp ngược lại nếu một trị riêng tương ứng với $s > 1$ hàm riêng thì ta nói $\hat{A}$ có trị riêng suy biến, s được gọi là bậc (bội) suy biến.

Trong trường hợp toán tử $\hat{A}$ có trị riêng a_i suy biến thì phương trình (2.30) được viết lại như sau:

$$\hat{A}\psi_{if} = a_i\psi_{if}, \text{ với } f = 1, 2, 3...s. \tag{2.32}$$

3.5 TOÁN TỬ TUYẾN TÍNH

Toán tử $\hat{A}$ được gọi là tuyến tính nếu và chỉ nếu, với mọi vectơ ψ_1 và ψ_2 thuộc không gian Hilbert và các số phức bất kỳ c_1 và c_2, ta có:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2; \text{ hay tổng quát hơn } \hat{A}\sum_i c_i\psi_i = \sum_i c_i\hat{A}\psi_i$$

Ví dụ, ta có thể chứng minh toán tử đạo hàm "d/dx" là toán tử tuyến tính, các toán tử "*log*", "exp" không phải là toán tử tuyến tính.

3.6 TOÁN TỬ HERMITE

a) Toán tử liên hợp Hermite:

Toán tử $\hat{A}^\dagger$ [1] gọi là liên hợp Hermite với toán tử $\hat{A}$ nếu và chỉ nếu, với hai

[1] Dấu được † được gọi là dấu dag, từ chữ dagger của tiếng Anh, nghĩa tiếng Việt là dao găm, dấu chữ thập

hàm bất kỳ ψ và ϕ trong không gian không gian Hilbert ta có:

$$\int_V \psi^* \hat{A}\phi dV = \int_V (\hat{A}^\dagger\psi)^*\phi dV. \tag{2.33}$$

Nếu viết theo ký hiệu Dirac thì:

$$\langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\phi\rangle \tag{2.34}$$

Cần lưu ý: $\hat{A}^\dagger = \widetilde{(\hat{A}^*)}$, trong đó dấu ($\sim$) chỉ sự chuyển vị (chỉ xét trong trường hợp toán tử được biểu diễn dưới dạng ma trận).

Các tính chất của toán tử liên hợp Hermite:

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}, \tag{2.35}$$

$$(a\hat{A}^\dagger)^\dagger = a^*\hat{A}^\dagger, \tag{2.36}$$

$$(\hat{A}^n)^\dagger) = (\hat{A}^\dagger)^n, \tag{2.37}$$

$$(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}+\hat{D})^\dagger) = \hat{A}^\dagger+\hat{B}^\dagger+\hat{C}^\dagger+\hat{D}^\dagger, \tag{2.38}$$

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D})^\dagger) = \hat{D}^\dagger\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger, \tag{2.39}$$

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}|\psi\rangle)^\dagger) = \langle\psi|\hat{D}^\dagger\hat{C}^\dagger\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger. \tag{2.40}$$

b) Toán tử tự liên hợp (toán tử Hermite):

$\hat{A}$ được gọi là toán tử tự liên hợp hay toán tử Hermite khi $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Như vậy, điều kiện để toán tử $\hat{A}$ là toán tử Hermite xuất phát từ (2.33) là:

$$\int_V \psi^*\hat{A}\phi dV = \int_V (\hat{A}\psi)^*\phi dV \quad \text{hay} \quad \langle\psi|\hat{A}\phi = \langle\hat{A}\psi|\phi\rangle \tag{2.41}$$

Ví dụ 3.3:
Toán tử $\dfrac{d}{dx}$ và toán tử $i\dfrac{d}{dx}$ có phải là toán tử Hermite không?
Lời giải:
a) Nếu toán tử $\dfrac{d}{dx}$ là toán tử Hermite thì ta có hệ thức:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\frac{d}{dx}\phi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx}\psi^*\phi dx. \tag{2.42}$$

Ta biến đổi vế trước bằng cách sử dụng tích phân từng phần:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d\phi}{dx} dx = \psi^*\phi\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \frac{d\psi^*}{dx} dx.$$

Vì hàm sóng triệt tiêu ở vô cùng nên số hạng $\psi^*\phi\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0$, từ đó

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d\phi}{dx} dx = -\int_{-\infty}^{+\infty} \phi \frac{d\psi^*}{dx} dx. \tag{2.43}$$

So sánh (2.43)với (2.42), ta thấy toán tử d/dx không phải là toán tử Hermite.

b) Nếu toán tử $i\dfrac{d}{dx}$ là toán tử Hermite thì ta có hệ thức:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (i\frac{d}{dx})\phi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (i\frac{d}{dx}\psi)^* \phi dx. \tag{2.44}$$

Vế trước của (2.44) là:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (i\frac{d\phi}{dx}) dx = i\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d\phi}{dx} dx.$$

Tích phân ở vế sau của (2.44) chính là vế trước của (2.42). Biến đổi tương tự như phần a) ta được:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* (i\frac{d\phi}{dx}) dx = -i\int_{-\infty}^{+\infty} \phi \frac{d\psi^*}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (i\frac{d\phi}{dx}\psi)^* dx. \tag{2.45}$$

Như vậy, toán tử $i\dfrac{d}{dx}$ là toán tử Hermite.

Ví dụ 3.4:

a) Chứng minh rằng tổng của hai toán tử Hermite là toán tử Hermite

b) Giả sử $\hat{A}$ là toán tử Hermite và α là một số phức. Với điều kiện nào thì của α thì $\alpha\hat{A}$ là Hermite?

c) Khi nào thì tích hai toán tử Hermite là Hermite

d) Chứng tỏ rằng toán tử tọa độ ($\hat{x} = x$) và toán tử Hamilton $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + V(x)$ là Hermite.

Lời giải:

a) Nếu toán tử tổng $\hat{A} + \hat{B}$ là Hermite thì ta có hệ thức:

$$\langle\psi|\hat{A} + \hat{B}|\phi\rangle = \langle(\hat{A} + \hat{B})\psi|\phi\rangle$$

Ta có:

$$\langle\psi|(\hat{A} + \hat{B})\phi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\phi\rangle + \langle\psi|\hat{B}\phi\rangle = \langle\hat{A}\psi|\phi\rangle + \langle\hat{B}\psi|\phi\rangle = \langle(\hat{A} + \hat{B})\psi|\phi\rangle.$$

Vậy tổng của 2 toán tử Hermite cũng là toán tử Hermite.

b) Nếu toán tử $\alpha\hat{A}$ là Hermite thì ta có hệ thức:

$$\langle\psi|\alpha\hat{A}\phi\rangle = \langle(\alpha\hat{A})\psi|\phi\rangle$$

Ta có: $\langle\psi|\alpha\hat{A}\phi\rangle = \alpha\langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \alpha\langle\hat{A}\psi|\phi\rangle = \langle\alpha^*\hat{A}\psi|\phi\rangle$. Như vậy, để cho $\alpha\hat{A}$ là toán tử Hermite thì ta phải có $\alpha^* = \alpha$, nghĩa là α là một số thực.

c) Nếu toán tử tích $\hat{A}\hat{B}$ là Hermite thì ta có hệ thức:

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{B}\phi\rangle = \langle(\hat{A}\hat{B})\psi|\phi\rangle.$$

Vì $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là toán tử Hermite nên:

$$\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\phi\rangle = \langle\hat{A}\psi|\hat{B}\phi\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\psi|\phi\rangle.$$

Như vậy để toán tử tích $\hat{A}\hat{B}$ là Hermite thì ta phải có $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, nghĩa là hai toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ phải giao hoán với nhau.

d) Để chứng tỏ toán tử tọa độ ($\hat{x} = x$) và toán tử Hamilton $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + V(x)$ là Hermite ta chứng minh hai hệ thức sau:

$$\langle\psi|\hat{x}\phi\rangle = \langle\hat{x}\psi|\phi\rangle \text{ và } \langle\psi|\hat{H}\phi\rangle = \langle\hat{H}\psi|\phi\rangle$$

Ta có:

$$\langle\psi|\hat{x}\phi\rangle = \langle\psi|x\phi\rangle = \langle x\psi|\phi\rangle = \langle\hat{x}\psi|\phi\rangle.$$

Vậy $\hat{x}$ là toán tử Hermite.

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{H}\phi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)\phi dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2\phi}{dx^2}dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* V\phi dx.
\end{aligned}$$

Lấy tích phân từng phần hai lần số hạng thứ nhất ở vế phải của biểu thức trên, ta được:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2\phi}{dx^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\psi^*}{dx^2} \phi dx.$$

Từ đó, nếu V(x) là thực thì ta có:

$$\langle \psi | \hat{H}\phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi \right)^* \phi dx = \langle \hat{H}\psi | \phi \rangle.$$

Vậy $\hat{H}$ là toán tử Hermite.

3.7 HÀM TOÁN TỬ

Gọi $F(\hat{A})$ là hàm của toán tử $\hat{A}$. Nếu $\hat{A}$ là toán tử tuyến tính, ta có thể khai triển Taylor hàm $F(\hat{A})$ thành chuỗi luỹ thừa của $\hat{A}$:

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n, \tag{2.46}$$

trong đó a_n là hệ số khai triển. Một ví dụ về hàm toán tử là hàm $e^{a\hat{A}}$. Hàm này có thể khai triển như sau:

$$e^{a\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} \hat{A}^n = \hat{I} + a\hat{A} + \frac{a^2}{2!}\hat{A}^2 + \frac{a^3}{3!}\hat{A}^3 + \cdots \tag{2.47}$$

Sau đây là một số tính chất của hàm toán tử:

(1) Nếu $\hat{A}$ giao hoán với $\hat{B}$ thì $\hat{B}$ sẽ giao hoán với hàm toán tử của $\hat{A}$, nghĩa là $[\hat{B}, F(\hat{A})] = 0$

(2) $F(\hat{A})$ giao hoán với $\hat{A}$ và một hàm bất kỳ của $\hat{A}$, nghĩa là $[\hat{A}, F(\hat{A})] = 0$, $[F(\hat{A}), G(\hat{A})] = 0$.

(3) Liên hiệp Hermite của $F(\hat{A})$ là $[F(\hat{A})]^\dagger = F^*(\hat{A}^\dagger)$. Nếu $\hat{A}$ là toán tử Hermite thì $F(\hat{A})$ không nhất thiết là Hermite. $F(\hat{A})$ là Hermite nếu và chỉ nếu F là hàm thực và $\hat{A}$ là Hermite. Ví dụ

$$(e^{a\hat{A}})^\dagger = e^{\hat{A}^\dagger}, (\mathrm{e}^{i\hat{A}})^\dagger = e^{-i\hat{A}^\dagger}, (\mathrm{e}^{ia\hat{A}})^\dagger = e^{-i\alpha^*\hat{A}^\dagger}, \tag{2.48}$$

trong đó α là một số phức.

(4) Nếu $\hat{A}$ là Hermite thì khai triển của hàm toán tử $F(\hat{A}) = \sum_n a_n \hat{A}^n$ là Hermite nếu và chỉ nếu hệ số a_n là thực.

3.8 TOÁN TỬ NGHỊCH ĐẢO VÀ TOÁN TỬ ĐƠN NGUYÊN

a) Toán tử nghịch đảo: Ta gọi $\hat{A}^{-1}$ là nghịch đảo của toán tử tuyến tính $\hat{A}$ nếu ta có hệ thức

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{I}, \tag{2.49}$$

trong đó $\hat{I}$ là toán tử đơn vị, đó là phép toán không làm thay đổi hàm khi nó tác dụng: $\hat{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

b) Thương của 2 toán tử: Giả sử có tồn tại toán tử $\hat{B}^{-1}$ là nghịch đảo của $\hat{B}$, thương của hai toán tử là:

$$\frac{\hat{A}}{\hat{B}} = \hat{A}\frac{\hat{I}}{\hat{B}} = \hat{A}\hat{B}^{-1} \text{ và } \frac{\hat{I}}{\hat{B}}\hat{A} = \hat{B}^{-1}\hat{A}. \tag{2.50}$$

Như vậy, chia một toán tử $\hat{A}$ cho một toán tử $\hat{B}$ thì tương đương với nhân $\hat{A}$ cho $\hat{B}^{-1}$. Nói chung $\hat{A}\hat{B}^{-1} \neq \hat{B}^{-1}\hat{A}$.

c) Toán tử đơn nguyên: Một toán tử $\hat{U}$ được gọi là đơn nguyên (unitary) nếu nghịch đảo của nó bằng liên hợp của nó: $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ hay $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{I}$.

Ta có thể chứng minh rằng tích của hai toán tử đơn nguyên cũng là toán tử đơn nguyên:

Thật vậy: $(\hat{U}\hat{V})(\hat{U}\hat{V})^\dagger = (\hat{U}\hat{V})(\hat{V}^\dagger\hat{U}^\dagger) = \hat{U}(\hat{V}\hat{V}^\dagger)\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$, hay $(\hat{U}\hat{V})^\dagger = (\hat{U}\hat{V})^{-1}$.

3.9 CÁC TÍNH CHẤT CỦA TOÁN TỬ HERMITE

Toán tử Hermite khảo sát trong cơ học lượng tử có các tính chất sau:

a) Tính chất 1: Trị riêng của toán tử Hermite là thực.

Chứng minh: Ta xét toán tử $\hat{A}$ có trị riêng a_i (không suy biến) ứng với hàm

riêng ψ_i thoả mãn phương trình trị riêng:

$$\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i \tag{2.51}$$

Ta chứng minh rằng nếu $\hat{A}$ là Hermite thì trị riêng a_i là thực, nghĩa là $a_i^* = a_i$. Theo định nghĩa của toán tử Hermite:

$$\langle\psi_i|\hat{A}\psi_i\rangle = \langle\hat{A}\psi_i|\psi_i\rangle \tag{2.52}$$

Thay phương trình trị riêng (2.51) vào (2.52) ta được:

$$\langle\psi_i|a_i\psi_i = \langle a_i\psi_i|\psi_i\rangle, \quad \text{hay} \quad (a_i - a_i^*)\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 0$$

Vì $\langle\psi_i|\psi_i\rangle\rangle 0$ nên ta được $a_i = a_i^*$. Vậy a_i là một số thực.

b) Tính chất 2: Các hàm riêng tương ứng với hai trị riêng phân biệt của toán tử Hermite thì trực giao với nhau.

Chứng minh: Ta xét toán tử $\hat{A}$ có hai trị riêng phân biệt a_i, a_j tương ứng với hai hàm riêng ψ_i, ψ_j, với $i \neq j$. Ta chứng minh rằng nếu $\hat{A}$ là Hermite thì ψ_i, ψ_j trực giao nhau, nghĩa là $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = 0$.

Theo định nghĩa của toán tử Hermite:

$$\langle\psi_i|\hat{A}\psi_j = \langle\hat{A}\psi_i|\psi_j\rangle$$

Thay phương trình trị riêng tương ứng với 2 trị riêng a_i, a_j vào ta được:

$$\langle\psi_i|a_j\psi_j = \langle a_i\psi_i|\psi_j\rangle \quad \text{hay} \quad (a_j - a_i^*)\langle\psi_i|\psi_j\rangle = 0$$

Vì $a_i \neq a_j$ nên $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = 0$. Điều này chứng tỏ hai hàm riêng ψ_i, ψ_j trực giao.

c) Tính chất 3: Các hàm riêng của toán tử Hermite thì lập thành một hệ cơ sở trực chuẩn và đầy đủ cho không gian Hilbert các hàm sóng.

Nếu $\hat{A}$ là toán tử Hermite thì các hàm riêng $\{\psi_i\}$ của nó sẽ lập thành một hệ cơ sở trực chuẩn và đầy đủ. Nghĩa là một hàm bất kỳ trong không gian Hilbert có thể khai triển thành tổ hợp tuyến tính của các $\{\psi_i\}$. Ta chứng minh rằng nếu $\psi = \sum\limits_i c_i\psi_i$ và $\phi = \sum\limits_j b_j\psi_j$ thì $\hat{A}$ là toán tử Hermite, nghĩa là:

$$\langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle\hat{A}\psi|\phi\rangle. \quad (2.53)$$

Chứng minh:

Thay các khai triển của hàm ψ và hàm ϕ vào vế trái của (2.53), ta được:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{A}\psi|\phi\rangle &= \langle\hat{A}\sum_i c_i\psi_i|\sum_j b_j\psi_j\rangle = \langle\sum_i c_i\hat{A}\psi_i|\sum_j b_j\psi_j\rangle \\
&= \langle\sum_i c_i a_i\psi_i|\sum_j b_j\psi_j\rangle = \sum_{i,j} c_i^* a_i^*.b_j\langle\psi_i|\psi_j\rangle \\
&= \sum_i c_i^* a_i^*(\sum_j b_j\delta_{i,j}) = \sum_i c_i^* a_i^* b_i
\end{aligned}$$

Tương tự ta có thể chứng minh được vế phải: $\langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \sum_i c_i^* b_i a_i^*$. Như vậy, hai vế của phương trình (2.53) trùng nhau, nên $\hat{A}$ là toán tử Hermite.

3.10 ĐIỀU KIỆN TRỰC CHUẨN CỦA HÀM RIÊNG

- Trường hợp toán tử có phổ trị riêng gián đoạn:

+ Phương trình trị riêng:

$$\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i \quad (2.54)$$

+ Điều kiện trực chuẩn:

$$\langle\psi_i|\psi_i\rangle = \delta_{ij} \quad (2.55)$$

+ Khai triển theo hàm riêng:

$$\psi = \sum_i c_i\psi_i \quad (2.56)$$

- Trường hợp toán tử có phổ trị riêng liên tục:

+ Phương trình trị riêng:

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a \quad (2.57)$$

+ Điều kiện trực chuẩn:

$$\langle\psi_a|\psi_{a'}\rangle = \delta(a - a') \quad (2.58)$$

+ Khai triển theo hàm riêng:

$$\psi = \int_a c_a \psi_a da, \tag{2.59}$$

trong đó $\delta(a - a')$ là hàm Delta-Dirac (xem phần phụ lục).

3.11 TOÁN TỬ CHIẾU

1. Tích trong và tích ngoài

a) Tích trong: Tích vô hướng của bra $\langle\phi|$ và ket $|\psi\rangle$ được gọi là tích trong (inner product):

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int_V \phi^* \psi dV. \tag{2.60}$$

Tích trong của $|\psi\rangle$ và $\langle\phi|$ là một số thực dương. Điều này tương tự như tích của số phức và liên hiệp phức của nó, hoặc tích vô hướng của 2 vectơ thông thường là một số vô hướng. Tích trong của bra $\langle\psi_j|$ và ket $|\hat{A}\psi_i\rangle$ là $\langle\psi_j|\hat{A}|\psi_i\rangle$ hoặc đơn giản là $\langle j|\hat{A}|i\rangle$.

b) Tích ngoài: Tích ngoài (outer product) của bra $\langle\phi|$ và ket $|\psi\rangle$ là $|\psi\rangle\langle\phi|$. Tích ngoài đóng vai trò như một toán tử. Nếu ta cho tích ngoài tác dụng lên ket $|\chi\rangle$ ta sẽ nhận được biểu thức $|\psi\rangle\langle\phi|\chi\rangle$. Như vậy, toán tử $|\psi\rangle\langle\phi|$ tác dụng lên $|\chi\rangle$ và chuyển $|\chi\rangle$ thành một ket tỉ lệ với $|\psi\rangle$.

2. Toán tử chiếu

Ta định nghĩa toán tử chiếu (projection operator) $\hat{P}_i$ là tích ngoài của ket $|\psi_i\rangle$ và bra $\langle\psi_i|$ tương ứng:

$$\hat{P}_i \equiv |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \equiv |i\rangle\langle i|. \tag{2.61}$$

Nếu tác dụng toán tử này lên một ket $|\phi\rangle$ bất kỳ: $\hat{P}_i|\phi\rangle = |i\rangle\langle i|\phi\rangle$ ta được một ket tỉ lệ với $|i\rangle$ với hằng số tỉ lệ là tích vô hướng (tích trong) $\langle\psi_i|\phi\rangle$. Toán tử $\hat{P}_i$ được gọi là toán tử chiếu vì nó chiếu $|\phi\rangle$ lên phương của ψ_i. Toán tử $\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i\hat{P}_i = |i\rangle\langle i|i\rangle\langle i| = |i\rangle\langle i| = \hat{P}_i$, trong đó các ket $|i\rangle$ là chuẩn hoá. Tương tự, ta có thể chứng minh rằng $\hat{P}_i^n = \hat{P}_i$. Điều này có nghĩa là hình chiếu của $|\phi\rangle$

lên $|i\rangle$ là giống nhau cho dù thực hiện một phép chiếu ($\hat{P}_i$), hai phép chiếu ($\hat{P}_i^2$) hay nhiều phép chiếu ($\hat{P}_i^n$) liên tiếp nhau.

Ví dụ 3.5:

Chứng tỏ rằng toán tử $\hat{P}_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ là toán tử chiếu nếu $|\psi_i\rangle$ thoả mãn điều kiện chuẩn hoá.

Lời giải:

Ta thấy rằng toán tử $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ là toán tử Hermite vì

$$\hat{\mathrm{P}}_i^2 = (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^2 = (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|.$$

Vì vậy, nếu $|\psi_i\rangle$ chuẩn hoá thì $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$, nên $\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i$.
Nói tóm lại, nếu trạng thái $\langle i|$ là chuẩn hoá thì tích $|i\rangle\langle i|$ là một toán tử chiếu.

§ 4 CÁC TOÁN TỬ CƠ BẢN TRONG HỌC LƯỢNG TỬ

Ta sẽ tìm dạng của các toán tử cơ bản diễn tả các đại lượng động lực (biến động lực) cùng với các trị riêng và hàm riêng tương ứng. Vì hàm sóng đang xét là hàm phụ thuộc biến số toạ độ nên dạng của các toán tử tìm được sẽ là các phép toán của toạ độ, lúc đó ta nói ta xét dạng của toán tử trong biểu diễn toạ độ hay x-biểu diễn. Để tìm dạng của các toán tử trong cơ lượng tử ta sử dụng "Nguyên lý tương ứng" có nội dung như sau: "*Hệ thức giữa các toán tử trong cơ lượng tử có dạng như hệ thức giữa các đại lượng trong cơ học cổ điển*"

4.1 TOÁN TỬ TỌA ĐỘ

Trong tọa độ Descartes, toán tử tọa độ được biểu diễn như sau:

$$\hat{\vec{r}} = \hat{x}\vec{i} + \hat{y}\vec{j} + \hat{z}\vec{k}$$

Trước hết cần lưu ý rằng trong x-biểu diễn thì: $\hat{x} = x$, và $\hat{U}(\hat{x}) = U(x)$, nghĩa là các toán tử này tác dụng lên hàm $\psi(x)$ chỉ đơn giản là phép nhân thông thường. Ta chỉ cần xét một thành phần của toán tử toạ độ, chẳng hạn thành

phần trên trục x.

Phương trình trị riêng của toán tử $\hat{x}$ là:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \tag{2.62}$$

Áp dụng tính chất của hàm delta: $(x - x_0)\delta(x - x_0) = 0$, ta có thể viết:

$$x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$$

Vì trong x-biểu diễn, $\hat{x} = x$ nên:

$$\hat{x}\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0) \tag{2.63}$$

So sánh với phương trình trị riêng (2.62) ta thấy toán tử $\hat{x}$ có hàm riêng $\delta(x-x_0)$ ứng với trị riêng x_0. Từ (2.63) ta thấy rằng trị riêng của $\hat{x}$ là một đại lượng liên tục.

Tóm lại, trong trường hợp 3 chiều toán tử toạ độ $\hat{\vec{r}}$ có:

a) Dạng: $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$

b) Trị riêng: $\vec{r} = \vec{r}_0$

c) Hàm riêng: $\psi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$, với $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ là hàm Delta-Dirac [2]

4.2 TOÁN TỬ XUNG LƯỢNG

(1) *Dạng của toán tử xung lượng*

Có nhiều cách để xác định dạng của toán tử xung lượng (momentum). Ở đây ta sẽ xuất phát từ móc Poisson cổ điển $\{p_j, q_k\} = \delta_{jk}$. Theo nguyên lý tương ứng thì trong cơ học lượng tử móc Poisson có dạng:

$$\{\hat{p}_j, \hat{x}_k\} = \delta_{jk}.$$

[2] Xem phần phụ lục

Hay:

$$(i/\hbar)[\hat{p_j}, \hat{x}_k] = \delta_{jk} \Rightarrow [(i/\hbar)\hat{p_x}, \hat{x}] = 1. \tag{2.64}$$

Ta có thể chứng minh được hệ thức giao hoán sau:

$$\left[\frac{d}{dx}, x\right] = 1. \tag{2.65}$$

Từ (2.64) và (2.65), ta tìm được dạng của toán tử $\hat{p}_x$:

$$(i/\hbar)\hat{p_x} = \frac{d}{dx} \rightarrow \hat{p_x} = (\hbar/i)\frac{d}{dx} = -i\hbar\frac{d}{dx}.$$

Tổng quát cho trường hợp 3 chiều ta có dạng của toán tử xung lượng:

$$\hat{\vec{P}} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}\right) \tag{2.66}$$

(2) Hàm riêng và trị riêng của toán tử xung lượng

Phương trình trị riêng của toán tử $\hat{p_x}$ là:

$$\hat{p_x}\psi(x) = p_x\psi(x)$$

Thay dạng của $\hat{p_x}$ vào, ta được

$$-i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx} = p_x\psi(x)$$

Phương trình này có nghiệm:

$$\psi(x) = Ce^{(i/\hbar)p_x x} \tag{2.67}$$

Vì x biến thiên liên tục nên giá trị của p_x cũng liên tục. Từ đó ta đi đến kết luận trị riêng của toán tử $\hat{p_x}$ là liên tục.

Để tìm hàm riêng chuẩn hoá, ta dùng điều kiện chuẩn hoá:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*_{p'_x}(x)\psi_{p_x}(x)dx = \delta(p_x - p'_x).$$

từ đó, ta được

$$|C^2|\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x - p'_x)x}dx = |C^2|2\pi\delta\left(\frac{p_x - p'_x}{\hbar}\right) = \delta(p_x - p'_x).$$

Do tính chất của hàm delta: $\delta(ax) = (1/|a|)\delta(x)$ nên ta tính được hệ số chuẩn hóa $C = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$.

Tóm lại, toán tử xung lượng $\hat{p_x}$ có:

(1) Dạng: $\hat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$,

(2) Trị riêng: p_x có giá trị liên tục,

(3) Hàm riêng: $\psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{(i/\hbar)(p_x x)}$.

Trong trường hợp 3 chiều thì:

(1) Dạng: $\hat{\vec{P}} = -i\hbar\nabla$,

(2) Trị riêng: $\vec{P}$ có giá trị liên tục,

(3) Hàm riêng:

$$\psi_{\vec{P}}(\vec{r}) == \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{(i/\hbar)(p_x x+p_y y+p_z z)} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{(i/\hbar)\vec{P}.\vec{r}}.$$

4.3 TOÁN TỬ NĂNG LƯỢNG

Trong cơ học cổ điển năng lượng toàn phần biểu thị qua xung lượng và tọa độ của hạt, được gọi là hàm Hamilton và có dạng:

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{(\vec{P})^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r})$$

Trong cơ học lượng tử, hàm Hamilton tương ứng với toán tử Hamilton hay còn gọi là Hamiltonian (theo tiếng Anh) hay Hamiltonien (theo tiếng Pháp):

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} + \hat{U}(\vec{r}) \tag{2.68}$$

Thay dạng của $\hat{\vec{P}}$ vào (2.68) và để ý rằng $\hat{U}(\vec{r}) = U(\vec{r})$ ta được

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}) \tag{2.69}$$

Phương trình trị riêng của toán tử năng lượng là:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{2.70}$$

Thay dạng của toán tử $\hat{H}$ ở (2.69) vào phương trình trên, ta được phương trình trị riêng của năng lượng dưới dạng phương trình vi phân bậc 2:

$$\Delta\psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = 0, \tag{2.71}$$

trong đó, toán tử Laplace có dạng tùy thuộc vào hệ tọa độ khảo sát. Chẳng hạn nếu xét trong hệ tọa độ Descartes 3 chiều thì:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Như vậy, dạng của toán tử năng lượng phụ thuộc vào dạng của thế năng, nghĩa là phụ thuộc vào trường thế mà trong đó hạt chuyển động. Từ đó, trị riêng và hàm riêng của toán tử cũng phụ thuộc vào tính chất của chuyển động của hạt. Việc giải phương trình cho trị riêng và hàm riêng của toán tử năng lượng là một bài toán cơ bản của cơ học lượng tử. Trong đa số trường hợp, ta chỉ xét bài toán một chiều (theo trục x):

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi(x) = 0. \tag{2.72}$$

4.4 TOÁN TỬ MOMEN XUNG LƯỢNG

Theo học cổ điển mômen xung lượng của hạt được xác định bởi:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}. \tag{2.73}$$

Trong hệ tọa độ Descartes, các thành phần của $\vec{L}$ là:

$$\begin{aligned} L_x &= yp_z - zp_y, \\ L_y &= zp_x - xp_z, \\ L_z &= xp_y - yp_x. \end{aligned} \tag{2.74}$$

Trong cơ học lượng tử, toán tử mômen xung lượng có dạng:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{P}}. \tag{2.75}$$

Các thành phần của toán tử mômen xung lượng trong hệ tọa độ Descartes có dạng:

$$\begin{aligned}\hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y,\\ \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z,\\ \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x.\end{aligned} \tag{2.76}$$

Thông thường, khi khảo sát mô-men xung lượng người ta thường dùng hệ toạ độ cầu (r, θ, ϕ) trong đó ta xét hai toán tử cơ bản, đó là toán tử hình chiếu mô-men xung lượng lên trục z $(\hat{L_z})$ và toán tử mô-men xung lượng toàn phần (hay là toán tử bình phương mô-men) $(\hat{L^2})$.

1) Toán tử $\hat{\mathbf{L_z}}$

a) Dạng của toán tử $\hat{L}_z$: Trong hệ toạ độ cầu, toán tử này có dạng:

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{2.77}$$

b) Trị riêng và hàm riêng:

Phương trình trị riêng của $\hat{L}_z$ là:

$$\hat{L}_z\psi(\phi) = L_z\psi(\phi). \tag{2.78}$$

Thay dạng của $\hat{L}_z$ vào (2.78):

$$-i\hbar\frac{d\psi(\phi)}{d\phi} = L_z\psi(\phi). \tag{2.79}$$

Giải phương trình vi phân bậc nhất này ta được hàm riêng là:

$$\psi(\phi) = Ce^{(i/\hbar)L_z\phi}.$$

Để xác định trị riêng ta dùng điều kiện đơn trị của hàm sóng:

$$\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi).$$

Từ đó:

$$e^{(i/\hbar)L_z 2\pi} = 1 = e^{i2\pi m} \Rightarrow L_z = m\hbar, \text{ với } m = 0, \pm1, \pm2, \pm3...$$

Như vậy, hàm riêng của $\hat{L}_z$ có thể viết lại như sau:

$$\psi_m(\phi) = Ce^{im\phi}.$$

Dùng điều kiện chuẩn hoá $\langle\psi_m|\psi_m\rangle = 1$, ta tìm được hệ số $C = 1/\sqrt{2\pi}$.

Tóm lại, trong hệ toạ độ cầu toán tử hình chiếu mô-men xung lượng lên trục z có:

(1) Dạng: $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$,

(2) Trị riêng: $L_z = m\hbar$ có giá trị gián đoạn: $L_z = 0\hbar, \pm1\hbar, \pm2\hbar, \pm3\hbar...$,

(3) Hàm riêng: $\psi_m(\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$.

2) Toán tử bình phương mômen xung lượng

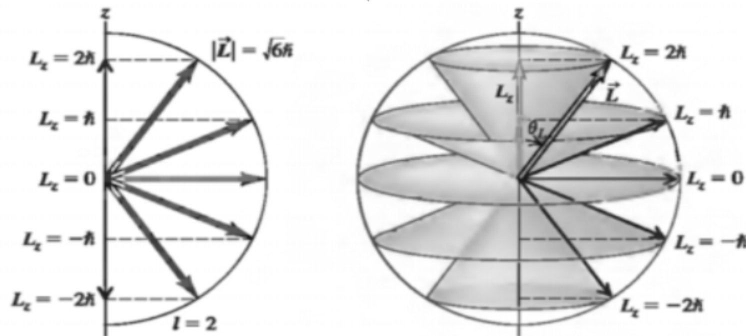
a) Dạng của toán tử $\hat{L^2}$: Trong hệ toạ độ cầu toán tử này có dạng:

$$\hat{L^2} = -\hbar^2\Delta_{\theta,\phi}, \tag{2.80}$$

với $\Delta_{\theta,\phi}$ là phần góc của toán tử Laplace trong hệ toạ độ cầu và có dạng như sau:

$$\Delta_{\theta,\phi} = \frac{1}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{\partial^2}{\partial^2\phi}\right]. \tag{2.81}$$

Phương trình trị riêng của toán tử $\hat{L}^2$ có dạng:



Hình 2.2: Minh hoạ hình học quan hệ giữ độ lớn của vectơ mômen xung lượng và hình chiếu của nó lên trục z.

$$-\hbar^2\Delta_{\theta,\phi}\psi(\theta,\phi) = L^2\psi(\theta,\phi). \tag{2.82}$$

Ở đây ta chưa giải phương trình này (xem cách giải ở chương VI) mà chỉ đưa ra kết quả về trị riêng và hàm riêng của nó:

b) Trị riêng:

$$L^2 = \hbar^2\ell(\ell+1) \text{ hay } L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}, \tag{2.83}$$

trong đó ℓ có các giá trị khả dĩ là 0, 1, 2, 3...

c) Hàm riêng:

$$\psi(\theta,\phi) = Y_{\ell m}(\theta,\phi) = P_{\ell m}(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{2.84}$$

trong đó $P_{\ell m}(\cos\theta)$ được gọi là đa thức Legendre liên kết (xem phần phụ lục).

4.5 HỆ THỨC GIAO HOÁN GIỮA CÁC TOÁN TỬ

Các hệ thức giao hoán cần nhớ

(a) $[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = 0$ (b) $[\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0$

(c) $[\hat{p}_j, x_k] = -i\hbar\delta_{jk}$ (d) $[f(x), \hat{p}_x] = i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}$

(e) $[\hat{L}_j, \hat{x}_k] = i\hbar\epsilon_{jk\ell}\hat{x}_\ell$ (f) $[\hat{L}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\epsilon_{jk\ell}\hat{p}_\ell$

(g) $[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\epsilon_{jk\ell}\hat{L}_\ell$ (h) $[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0$

Trong các hệ thức trên $\epsilon_{jk\ell}$ được gọi là tensor Levi-Civital. Tensor này có giá trị bằng 0 khi có ít nhất 2 chỉ số trùng nhau và có giá trị bằng ±1 khi 3 chỉ số phân biệt nhau. Cụ thể như sau:

$$\epsilon_{jk\ell} = \begin{cases} +1, & \text{khi các hoán vị của } j,k,\ell \text{ tuân theo chiều kim đồng hồ} \\ -1, & \text{khi các hoán vị của } j,k,\ell \text{ tuân theo chiều kim đồng hồ} \end{cases}$$

§ 5 TÓM TẮT CHƯƠNG 2

- Khái niệm xác suất trong phép đo một đại lượng động lực là rất quan trọng để mô tả tính chất thống kê trong cơ lượng tử. Xác suất để đo đại

lượng A được giá trị a_k là w_k nếu A có giá trị gián đoạn. Trường hợp A giá trị liên tục ta sẽ thay khái niệm xác suất bằng mật độ xác suất $\rho(a)$ là xác suất để khi đo A ta được giá trị a.

- Trị trung bình trong phép đo một đại lượng động lực theo lý thuyết xác suất là: $\bar{A} = \sum_k a_k w_k$ nếu A có giá trị liên tục, hoặc $\bar{A} = \int_a a\rho(a)da$ nếu A có giá trị liên tục.

- Hàm sóng đặc trưng cho trạng thái của hạt vi mô được biểu diễn bằng một phần tử của không gian Hilbert, đó là một không gian tuyến tính phức vô hạn chiều được trang bị một tích vô hướng $\langle\phi|\psi\rangle$, trong đó $|\psi\rangle$ được gọi là vectơ ket, $\langle\phi|$ được gọi là vectơ bra. Một phần tử ψ bất kỳ của không gian Hilbert có thể khai triển thành tổ hợp tuyến tính của các vectơ cơ sở trực chuẩn ϕ_i: $\psi = \sum_i c_i\phi_i$.

- Các toán tử cơ bản trong cơ học lượng tử tương ứng với các đại lượng động lực cơ bản như toạ độ, xung lượng, năng lượng, momen xung lượng. Toán tử toạ độ và xung lượng có trị riêng liên tục, trong lúc đó toán tử hình chiếu mômen xung lượng lên trục z và toán tử mômen toàn phần có trị riêng gián đoạn. Tính gián đoạn hoặc liên tục của toán tử năng lượng phụ thuộc vào dạng của thế năng.

§ 6 BÀI TẬP CHƯƠNG 2

1. Tìm hàm riêng và trị riêng của các toán tử sau:
   a)$\hat{A} = -i\frac{d}{dx}$, nếu hàm riêng thoả mãn điều kiện: $\psi(x) = \psi(x+L)$; với L= const
   b)$\hat{B} = -\frac{d^2}{dx^2}$, nếu hàm riêng thoả mãn điều kiện: $\psi(x) = 0$ tại $x = 0$ và $x = L$.

2. Chứng minh các hệ thức giao hoán sau:

a) $[x, \hat{p}_x] = i\hbar,$

b) $[x^n, \hat{p}_x] = in\hbar x^{n-1}$, với $n > 1$

3. Kiểm tra các hệ thức giao hoán sau:

a) $[f(x), \hat{p_x}] = i\hbar\dfrac{\partial f(x)}{\partial x}$

b) $[f(x), \hat{p_x^2}] = 2i\hbar\dfrac{\partial f(x)}{\partial x}\hat{p_x} + \hbar^2\dfrac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}$

c) $[x^2, [x, \hat{p_x^2}]] = -4\hbar^2 x$

4. Kiểm tra hệ thức giao hoán sau đối với hạt chuyển động trong trường thế năng U(x)

a) $[\hat{H}, \hat{x}] = -\dfrac{i\hbar}{m}\hat{p_x}$

b)$[\hat{H}, \hat{p_x^2}] = 2i\hbar\dfrac{\partial U(x)}{\partial x}\hat{p_x} + \hbar^2\dfrac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2}$

5. Chứng minh rằng nếu hai toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là Hermite và không giao hoán với nhau thì toán tử $[\hat{A}, \hat{B}]$ là không Hermite, trong lúc đó toán tử $i[\hat{A}, \hat{B}]$ là Hermite

6. Chứng minh các toán tử sau đây là Hermite:

a) $\hat{p_x}$ $\qquad$ *b)* $\hat{p_x^2}$

7. Xét hai toán tử $\hat{A} = d/dx$ và $\hat{B} = d^2/dx^2$ tác dụng lên hai hàm trực chuẩn $\psi_1 = C\sin nx$ và $\psi_2 = C\cos nx$, trong đó $n = 1, 2, 3, \ldots, C = 1/\sqrt{\pi}$ và $x \in (-\pi, \pi)$. Toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ có phải là Hermite không?

8. Chứng minh các toán tử $\hat{L_z}$ và $\hat{L_z^2}$ là Hermite.

9. Kiểm tra các hệ thức giao hoán sau:

a) $[\hat{x}, \hat{L_x}] = 0$; b) $[\hat{y}, \hat{L_x}] = -i\hbar z$; c) $[\hat{L_x}, \hat{p_x}] = 0$;

d) $[\hat{L_x}, \hat{p_z}] = -i\hbar\hat{p_y}$; e) $[\hat{L_x}, \hat{P_x^2}] = 0$; f) $[\hat{L^2}, \hat{L_i}] = 0$, i=x, y, z.

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. a) Phương trình trị riêng của toán tử Â: $\hat{A}\psi = a\psi$.

   Thay dạng của toán tử Â vào:

   $-i\frac{d}{dx}\psi = a\psi$, giải ra ta được: $\psi(x) = Ce^{iax}$

   Dùng điều kiện biên đã cho:

   $\psi(x) = \psi(x+L) \Rightarrow Ce^{iax} = Ce^{ia(x+L)} \Rightarrow e^{iaL} = 1 = e^{i2\pi n}$.

   Từ đó, ta được trị riêng: $a = a_n = \frac{2\pi n}{L}$, với $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

   b) Phương trình trị riêng của toán tử $\hat{B}$: $\hat{B}\psi = b\psi$.

   Thay dạng của toán tử $\hat{B}$ vào:

   $-\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = b\psi \Rightarrow \dfrac{d^2}{dx^2}\psi + b\psi = 0$

   Giải ra ta được: $\psi(x) = C_1\cos(\sqrt{b}x) + C_2\sin(\sqrt{b}x)$

   Dùng điều kiện biên:

   $+\ \psi(0) = 0 \Rightarrow C_1 = 0$

   $+\psi(L) = 0 \Rightarrow \sin(\sqrt{b}L) = 0 \Rightarrow b = b_n = (\frac{n\pi}{L})^2$, với $n = 1, 2, 3, \ldots$.

2. a) Để chứng minh hệ thức $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$ ta tác dụng hệ thức này lên hàm $\psi(x)$. Thay dạng của toán tử $\hat{p}_x$ vào vế trái, lấy đạo hàm và áp dụng tính chất giới nội của hàm $\psi(x)$ ta được kết quả như ở vế phải.

   b) Có 3 cách để chứng minh hệ thức $[x^n, \hat{p}_x] = in\hbar x^{n-1}$:

   (1) Dùng phương pháp quy nạp: $[x^n, \hat{p}_x] = in\hbar x^{n-1}$ đúng khi $n = k$, nghĩa là: $[x^k, \hat{p}_x] = ik\hbar x^{k-1}$, ta sẽ chứng minh hệ thức này đúng cho trường hợp $n = k+1$:

   $$[x^{k+1}, \hat{p}_x] = [x^k x, \hat{p}_x] = x^k[x, \hat{p}_x] + [x^k, \hat{p}_x]x.$$

   Vì $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$ và $[x^k, \hat{p}_x] = ik\hbar x^{k-1}$ nên:

   $$[x^{k+1}, \hat{p}_x] = i\hbar x^k + (ik\hbar x^{k-1})x = i\hbar(k+1)x^k.$$

   Hệ thức này đúng cho k bất kỳ nên cũng đúng cho $k = n-1$: $[x^n, \hat{p}_x] = in\hbar x^{n-1}$

(2) Sử dụng hệ thức: $[\hat{A}^n, \hat{B}] = \hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}^{n-1}, \hat{B}]\hat{A}$ và $[x, \hat{p}_x] = i\hbar$ ta sẽ tìm được:

$$[x^2, \hat{p}_x] = x[x, p_x] + [x, \hat{p}_x]x = 2i\hbar x.$$

Tiếp tục tính như trên với bậc số mũ của x^n cao hơn, ta được hệ thức cần chứng minh.

(3) Tác dụng $[x^n, \hat{p}_x]$ lên hàm $\psi(x)$. Thay dạng của toán tử $\hat{p}_x$ vào vế trái, lấy đạo hàm và áp dụng tính chất giới nội của hàm $\psi(x)$ ta được kết quả như ở vế phải.

3. a) Khai triển $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
Tác dụng hàm sóng $\psi(x)$ lên giao hoán tử $[f(x), \hat{p_x}]$:
$[f(x), \hat{p_x}]\psi(x) = (f(x)\hat{p_x}\psi - \hat{p_x}f(x)\psi) = (-i\hbar)\big(f(x)\frac{d}{dx}\psi - \frac{d}{dx}(f(x)\psi)\big)$
Tính ra ta được: $[f(x), \hat{p_x}] = i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}$.
b) Tương tự như câu 3a), thay dạng của toán tử $\hat{p_x^2} = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}$ vào và tính toán sau đó thay $\frac{d}{dx} = \frac{i}{\hbar}\hat{p_x}$ ta được kết quả.
c) Tính móc $[x, \hat{P_x^2}]$ trước rồi thay vào $[x^2, [x, \hat{p_x^2}]]$ để tính.

4. Tương tự như bài 3 nhưng trong trường hợp này toán tử Hamilton có dạng: $\hat{H} = \hat{p_x^2}/2m + U(x)$.

5. a) Ta cần chứng minh: $\langle\psi_1|[\hat{A}, \hat{B}]\psi_2\rangle \neq \langle[\hat{A}, \hat{B}]\psi_1|\psi_2\rangle$(*)
Khai triển móc $[\hat{A}, \hat{B}]$ rồi thay vào (*) và dùng tính chất Hermitic của toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$, ta tính được:
$\langle\psi_1|[\hat{A}, \hat{B}]\psi_2\rangle = -\langle[\hat{A}, \hat{B}]\psi_1|\psi_2\rangle$ (**).
b) Ta cần chứng minh: $\langle\psi_1|i[\hat{A}, \hat{B}]\psi_2\rangle = \langle i[\hat{A}, \hat{B}]\psi_1|\psi_2\rangle$ (***).
Dùng kết quả (**) ta chứng minh được (***)

6. Dựa vào biểu thức định nghĩa của toán tử Hermite

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}\psi_1|\psi_2\rangle \text{ hay } \int_V \psi^*\hat{A}\psi_2 dV = \int_V (\hat{A}\psi_1)^*\psi_2 dV.$$

a) Nếu toán tử $\hat{p_x}$ là Hermite thì ta có hệ thức:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_1)^*\psi_2 dx.$$

Sử dụng tích phân từng phần để tính vế trước, ta sẽ thấy nó sẽ bằng vế sau. Như vậy toán tử $\hat{p_x}$ là Hermitic.

b) Nếu toán tử $\hat{p_x^2}$ là Hermite thì ta có hệ thức:

$$\langle\psi_1|\hat{p_x^2}\psi_2\rangle = \langle\hat{p_x^2}\psi_1|\psi_2\rangle.$$

Hay

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_2)dx = \int_{-\infty}^{\infty} (-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1)^*\psi_2 dx.$$

Sử dụng tích phân từng phần 2 lần để tính vế trước, ta sẽ thấy nó sẽ bằng vế sau. Như vậy toán tử $\hat{p_x^2}$ là Hermite.

7. Nếu $\hat{A}$ là toán tử Hermite thì ta có:

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}\psi_1\rangle|\psi_2\rangle. \tag{2.85}$$

+ Vế phải của (2.85):

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle &= C^2\int_{-\pi}^{\pi}\sin nx\frac{d}{dx}\cos nxdx = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\sin nx(-\sin nx)dx\\ &= -\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\sin^2 nxdx = \ldots = -\frac{1}{2}.\end{aligned}$$

+ Vế trái của (2.85):

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\psi_1|\psi_2\rangle &= C^2\int_{-\pi}^{\pi}(\frac{d}{dx}\sin nx)\cos nxdx = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\cos nx\cos nx)dx\\ &= \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\cos^2 nxdx = \ldots = \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

Ta thấy rằng vế phải và vế trái của (2.85) khác nhau nên toán tử $\hat{A}$ không phải là toán tử Hermite.

Nếu $\hat{B}$ là toán tử Hermite thì ta có:

$$\langle\psi_1|\hat{B}\psi_2\rangle = \langle\hat{B}\psi_1\rangle|\psi_2\rangle. \tag{2.86}$$

+ Vế phải của (2.86):

$$\langle\psi_1|\hat{B}\psi_2\rangle = C^2\int_{-\pi}^{\pi}\sin nx\frac{d^2}{dx^2}\cos nx dx = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\sin nx(-\cos nx)dx.$$

+ Vế trái của (2.86):

$$\langle\hat{B}\psi_1|\psi_2\rangle = C^2\int_{-\pi}^{\pi}(\frac{d^2}{dx^2}\sin nx)\cos nx dx = -\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}(-\sin nx)\cos nx dx.$$

Ta thấy rằng vế phải và vế trái của (2.86) bằng nhau nên toán tử $\hat{B}$ là toán tử Hermite.

8. Dựa vào biểu thức định nghĩa của toán tử Hermite

$$\langle\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle = \langle\hat{A}\psi_1|\psi_2\rangle$$

a) Nếu toán tử $\hat{L_z}$ là Hermite thì ta có hệ thức:

$$\langle\psi_1|\hat{L_z}\psi_2\rangle = \langle\hat{L_z}\psi_1|\psi_2\rangle$$

Hay $\int\limits_0^{2\pi}\psi_1^*(\varphi)(-i\hbar)\frac{\partial\psi_2(\varphi)}{\partial\varphi}d\varphi = \int\limits_0^{2\pi}(-i\hbar\frac{\partial\psi_1(\varphi)}{\partial\varphi})^*\psi_2(\varphi)d\varphi$

Sử dụng tích phân từng phần để tính vế trước, ta sẽ thấy nó sẽ bằng vế sau. Như vậy toán tử $\hat{L_z}$ là Hermitic

b) Nếu toán tử $\hat{L_z^2}$ là Hermite thì ta có hệ thức:

$$\langle\psi_1|\hat{L_z^2}\psi_2\rangle = \langle\hat{L_z^2}\psi_1|\psi_2\rangle$$

Hay $\int\limits_0^{2\pi}\psi_1^*(\varphi)(-\hbar^2)\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi_2(\varphi)d\varphi = \int\limits_0^{2\pi}(-\hbar^2\frac{\partial^2\psi_1(\varphi)}{\partial\varphi^2})^*\psi_2(\varphi)d\varphi$

Sử dụng tích phân từng phần 2 lần để tính vế trước, ta sẽ thấy nó sẽ bằng vế sau. Như vậy toán tử $\hat{L_z^2}$ là Hermitic

9. Dùng các biểu thức của toán tử hình chiếu $\hat{L_x}, \hat{L_y}$ trong toạ độ Descartes, rồi dùng các tính chất của giao hoán tử. Trong quá trình tính toán có thể dùng công thức $[\hat{P_j}, x_k] = -i\hbar\delta_{jk}$.

Chương 3

Các tiên đề trong cơ học lượng tử

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là trình bày các tiên đề của cơ học lượng tử. Đó là sự đặt tương ứng các khái niệm toán học đã trình bày ở Chương 2 với các khái niệm và tính chất vật lý của hạt vi mô ở Chương 1.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ nắm được các biểu diễn toán học của các khái niệm cơ bản trong cơ học lượng tử như: trạng thái, phép đo trong cơ lượng tử và xác suất để đo các đại lượng động lực, trị trung bình và độ bất định trong phép đo các đại lượng động lực. Sinh viên cũng sẽ giải được các bài toán liên quan đến việc tính xác suất và trị trung bình của các đại lượng động lực ở một trạng thái đã cho.

§ 1 MỞ ĐẦU

Hệ hình thức của cơ lượng tử dựa trên một số các tiên đề. Trong các giáo trình cơ học lượng tử trong và ngoài nước hiện nay có hai cách trình bày cơ học lượng tử, đó là đưa ra các tiên đề hoặc không đưa ra các tiên đề. Đến nay, có thể nói rằng chưa có một sự thống nhất về cách trình bày thứ tự các tiên đề và nội dung các tiên đề của cơ học lượng tử. Sự khác biệt này hoàn toàn tùy thuộc vào chủ quan của các tác giả. Điều đáng để ý là số lượng và số thứ tự các tiên đề không giống nhau, thậm chí còn khác nhau xa. Trong tài liệu này,

chúng tôi đưa ra 4 tiên đề với tiêu đề như sau:

(1). Tiên đề I: Trạng thái và thông tin

(2). Tiên đề II: Các đại lượng động lực

(3). Tiên đề III: Tính chất thống kê trong cơ lượng tử

(4). Tiên đề IV: Sự thay đổi trạng thái theo thời gian.

Các tiên đề này sẽ trả lời được 3 vấn đề cơ bản sau:

(1). Trạng thái lượng tử của một hạt vi mô được mô tả bằng toán học như thế nào tại thời điểm t?

(2). Làm thế nào để tính các đại lượng vật lý khác từ trạng thái này?

(3). Khi biết trạng thái tại thời điểm t, làm thế nào để tìm trạng thái của hạt tại thời điểm $t\,'$ sau đó?

§ 2 TIÊN ĐỀ I: TRẠNG THÁI VÀ THÔNG TIN

Trong cơ học cổ điển, trạng thái của một hạt tại một thời điểm t bất kỳ được xác định bởi hai đại lượng động lực cơ bản là tọa độ q và xung lượng p. Khi biết q và p thì có thể biết được các thông tin về hạt, chẳng hạn như quỹ đạo, năng lượng...

Trong cơ học lượng tử, tọa độ và xung lượng không bao giờ được xác định đồng thời chính xác (nguyên lý bất định Heisenberg), vì vậy không thể dùng cặp đại lượng động lực này để diễn tả trạng thái của hệ. Tiên đề I đề cập đến trạng thái của một hạt hoặc hệ hạt trong cơ học lượng tử và được phát biểu như sau:

Trạng thái của một hạt (hoặc một hệ hạt) lượng tử được xác định bởi một hàm chuẩn hoá của tọa độ không gian và thời gian. Hàm này chứa toàn bộ thông tin về hạt.

Từ Tiên đề I ta chú ý các điểm sau:

(1) Hàm sóng $\Psi(q, t)$ tương ứng với trạng thái của hạt (hệ hạt) vi mô được gọi là hàm trạng thái, hay đôi khi gọi là vectơ trạng thái hoặc đơn giản là trạng

thái. Hàm trạng thái là một phần tử của không gian Hilbert và đôi khi được ký hiệu là ket $|\Psi(q,t)\rangle$. Các thành phần của biến không gian q phụ thuộc vào hệ tọa độ khảo sát. Nếu hạt chuyển động theo một chiều (ví dụ theo trục x) thì hàm trạng thái là $\Psi(x,t)$. Nếu chuyển động của hạt được khảo sát trong hệ tọa độ Descartes 3 chiều thì hàm trạng thái là $\Psi(\vec{r},t)$. Nếu khảo sát trong hệ tọa độ cầu thì hàm trạng thái là $\Psi(r,\theta,\phi;t)$

(2) Hàm trạng thái thỏa mãn câc tính chất cơ bản của hàm sóng, đó là đơn trị, liên tục, giới nội và bình phương khả tích. Sự tương ứng giữa trạng thái và hàm sóng là tương ứng $1-1$, ngoại trừ trường hợp hai hàm sóng khác nhau bởi một thừa số vô hướng có bình phương mô-đun bằng đơn vị thì tương ứng với cùng một trạng thái. Điều ày có nghĩa là nếu Ψ_1 và Ψ_2 cùng tương ứng với một trạng thái thì ta có $\Psi_1 = c\Psi_2$ với $|c|^2 = 1$.

§ 3 TIÊN ĐỀ II: CÁC ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC

Trong cơ cổ điển một đại lượng động lực A chỉ đơn giản là một biến số động lực có thể đo được (observable). Phép đo một đại lượng động lực A được hiểu là một tác động vật lý đặt lên hệ để thu được một số thực được gọi là "giá trị của A". Để đơn giản ta sẽ xét phép đo không có sai số [1]. Ta đã biết, trong cơ học cổ điển không có sự phân biệt giữa biểu diễn toán học của đại lượng và giá trị đo được của đại lượng động lực. Trong lúc đó trong cơ học lượng tử sự phân biệt này là cơ bản. Tiên đề II sẽ đề cập đến biểu diễn toán học của một đại lượng động lực A và các giá trị khả dĩ của nó và được phát biểu như sau:

Tương ứng với mỗi đại lượng động lực A là một toán tử tuyến tính và Hermite $\hat{A}$ tác dụng trong không gian Hilbert các hàm trạng thái. Các kết quả đo được về đại lượng A chỉ có thể là các trị riêng của toán tử $\hat{A}$.

Từ Tiên đề II ta chú ý các điểm sau:

(1). Phép đo một đại lượng động lực A có thể được biểu diễn bằng cách tác

[1] Sai số ở được hiểu theo nghĩa là sai số của phép đo do dụng cụ đo và chủ quan người đo.

dụng toán tử $\hat{A}$ lên trạng thái $|\Psi\rangle$. Kết quả thu được của một phép đo chính là một trong các trị riêng (phổ trị riêng) của toán tử $\hat{A}$. Phổ trị riêng này có thể gián đoạn hoặc liên tục. Điều này sẽ tương ứng với hai phương trình trị riêng của toán tử $\hat{A}$ như sau:

$$\hat{A}|i\rangle = a_i|i\rangle, \quad \text{đối với trường hợp phổ trị riêng gián đoạn}$$
$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, \quad \text{đối với trường hợp phổ trị riêng liên tục}$$

trong đó $|i\rangle$ hoặc $|a\rangle$ là các hàm riêng trực chuẩn của toán tử $\hat{A}$.

(2). Nếu khi đo đại lượng động lực A ta được giá trị a thì ngay sau đó hạt (hệ) sẽ ở trạng thái được biểu diễn bằng hàm sóng $|\Psi\rangle = |\Psi_a\rangle$ (phép đo làm nhiễu loạn trạng thái của hạt).

(3). Tính chất tuyến tính của toán tử $\hat{A}$ liên quan đến nguyên lý chồng chất các trạng thái, trong lúc đó tính chất Hermite của $\hat{A}$ liên quan đến "tính thực" của giá trị đo được của đại lượng động lực A.

§ 4 TIÊN ĐỀ III: TÍNH CHẤT THỐNG KÊ TRONG LƯỢNG TỬ

Trong Tiên đề I ta đã đặt tương ứng trạng thái vật lý với một vectơ trạng thái của không gian Hilbert, còn trong Tiên đề II ta đã đồng nhất một đại lượng động lực với một toán tử tuyến tính và Hermite tác dụng trong không gian Hilbert các hàm sóng. Bây giờ ta sẽ thiết lập mối quan hệ giữa hàm trạng thái và toán tử biểu diễn các đại lượng động lực của hệ. Mối quan hệ này được thực hiện nhờ phép đo.

Lý thuyết lượng tử về phép đo đóng vai trò cơ bản trong cấu trúc lý thuyết của cơ học lượng tử. Chúng ta sẽ không đi sâu vào lý thuyết về phép đo mà chỉ đề cập đến đặc trưng cơ bản của phép đo trong cơ học lượng tử, đó là tính thống kê. Nội dung của Tiên đề III là đưa ra cách xác định xác suất trong phép

đo một đại lượng động lực.

4.1 TRƯỜNG HỢP ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC CÓ PHỔ TRỊ RIÊNG GIÁN ĐOẠN

Trước hết, ta xét đại lượng động lực có giá trị gián đoạn. Nếu một toán tử $\hat{A}$ tương ứng với đại lượng động lực A có hệ hàm riêng $\{\psi_k\}$ và tập các trị riêng $\{a_k\}$, với $(k = 1, 2, 3...)$ thì phép đo đại lượng A được thực hiện trên hệ ở một trạng thái $|\Psi\rangle$ tại một thời điểm nhất định cho ta giá trị a_k nào đó với xác suất tương ứng w_k tuân theo tiên đề sau:

Xác suất để trong phép đo đại lượng động lực A ở trạng thái $|\Psi\rangle$ được giá trị a_k là $|c_k|^2$, trong đó c_k là hệ số trong khai triển hàm sóng Ψ theo hàm riêng ψ_k của toán tử $\hat{A}$:

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle, \tag{3.1}$$

hệ số c_k ở phương trình trên được tính như sau:

Nhân vô hướng hai vế của phương trình (3.1) cho $\langle\psi_j|$ rồi dùng điều kiện trực chuẩn của hàm riêng của toán tử $\hat{A}$, ta được:

$$\langle\psi_j|\Psi\rangle = \langle\psi_j|\sum_k c_k\psi_k\rangle = \sum_k c_k\langle\psi_j|\psi_k\rangle = \sum_k c_k\delta_{jk} = c_j$$

Nếu sử dụng tích phân thì cách tính trên tương đương với việc nhân hai vế của phương trình (3.1) cho ψ_j^* rồi lấy tích phân theo toàn bộ miền biến thiên của biến số:

$$\int_V \psi_j^*\Psi dV = \int_V \psi_j^* \sum_k c_k\psi_k dV = \sum_k c_k \int \psi_j^*\psi_k dV = \sum_k c_k\delta_{jk} = c_j$$

Như vậy, xác suất w_k có thể viết lại như sau:

$$w_k = |c_k|^2 = |\langle\psi_k|\Psi\rangle|^2. \tag{3.2}$$

Nếu hàm sóng chưa chuẩn hóa thì hệ thức (3.2) trở thành

$$w_k = |c_k|^2 = \frac{|\langle\psi_k|\Psi\rangle|^2}{\langle\Psi|\Psi\rangle}. \tag{3.3}$$

Nếu trị riêng a_k suy biến bội m thì

$$w_k = |c_k|^2 = \sum_{j=1}^{m} |\langle \psi_k^j | \Psi \rangle|^2 \tag{3.4}$$

Từ Tiên đề III ta chú ý các điểm sau:

(1). Xác suất w_k có giá trị ở trong khoảng $(0, 1)$. Khi $w_k = 1$, ta nói giá trị a_k hoàn toàn được xác định, nghĩa là đo được chính xác, trường hợp này ta phải có điều kiện $\Psi = \psi_k$. Ngược lại, khi $w_k = 0$, ta nói a_k hoàn toàn không đo được. Trong trường hợp tổng quát ta nói phép đo đại lượng động lực A để được giá trị a_k luôn luôn có một xác suất w_k thoả mãn điều kiện: $0 \leqslant w_k \leqslant 1$.

(2). Trong phép đo đại lượng động lực A ta thu được một số giá trị $a_1, a_2, a_3 ....$ với các xác suất tương ứng là $w_1, w_2, w_3 ....$, theo điều kiện chuẩn hoá xác suất thì tổng các xác suất này phải bằng đơn vị:

$$\sum_k w_k = 1. \tag{3.5}$$

Để chứng minh hệ thức này, ta để ý rằng vế phải của (3.5) chính là tích vô hướng $\langle \Psi | \Psi \rangle$. Khai triển Ψ theo các hàm riêng của toán tử $\hat{A}$, ta được:

$$\begin{aligned} 1 = \langle \Psi | \Psi \rangle &= \langle \sum_k c_k \psi_k | \sum_j c_j \psi_j \rangle = \langle \sum_k \sum_j c_k^* c_j \langle \psi_k | \psi_j \rangle \\ &= \sum_k \sum_j c_k^* c_j \delta_{kj} = \sum_k c_k^* c_k = \sum_k |c_k|^2 = \sum_k w_k. \end{aligned}$$

(3). Nếu tiến hành hai phép đo riêng biệt nhưng giống nhau trên cùng một hệ mà trạng thái của hệ trước mỗi lần đo hoàn toàn giống nhau thì kết quả của hai lần đo này không nhất thiết phải trùng nhau. Từ đó ta buộc phải chấp nhận *tính không tiên đoán được* và *tính không đồng nhất* của quá trình đo như là một thuộc tính vốn có của hệ vi mô.

4.2 TRƯỜNG HỢP ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC CÓ PHỔ TRỊ RIÊNG LIÊN TỤC

Trường hợp toán tử $\hat{A}$ có phổ liên tục thì khai triển của một hàm sóng Ψ bất kỳ không có dạng (3.1) nữa mà sẽ có dạng:

$$\Psi = \int_a c_a \psi_a da. \tag{3.6}$$

Khi đó, ta không thể nói đến xác suất w_k để đo được một giá trị a_k nhất định của đại lượng động lực A mà chỉ nói đến xác suất $dw(a)$ để đại lượng A có giá trị ở trong khoảng từ a đến $a + da$. Xác suất này tuân theo hệ thức:

$$dw(a) = \rho(a)da, \tag{3.7}$$

trong đó $\rho(a)$ được gọi là mật độ xác suất. Như vậy, đối với trường hợp các đại lượng động lực liên tục thì Tiên đề III được phát biểu như sau:

Mật độ xác suất để trong phép đo đại lượng động lực A ở trạng thái $\mathbf{\Psi}$ *được giá trị a là* $|c_a|^2$*, trong đó* c_a *là hệ số trong khai triển hàm trạng thái* Ψ *theo hàm riêng của toán tử* $\hat{A}$*:*

$$\Psi = \int_a c_a \psi_a da. \tag{3.8}$$

Tương tự như hệ số c_k, hệ số c_a được tính theo công thức: $c_a = \langle \psi_a | \Psi \rangle$. Từ đó, mật độ xác suất $\rho(a)$ có dạng:

$$\rho(a) = |c_a|^2 = |\langle \psi_a | \Psi \rangle|^2.$$

Mật độ xác suất $\rho(a)$ cũng thoả mãn các tính chất tương tự như xác suất w_k, nghĩa là:

$$0 \leqslant \rho(a) \leqslant 1. \quad \int_a \rho(a)da = 1. \tag{3.9}$$

4.3 TRỊ TRUNG BÌNH TRONG PHÉP ĐO MỘT ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC

Ta xét một chuỗi phép đo đại lượng động lực A ở trạng thái $|\Psi\rangle$. Giả sử rằng trạng thái trước mỗi lần đo là như nhau. Ta ký hiệu $\langle A\rangle$ hoặc $\bar{A}$ là trung trình các giá trị thu được trong các lần đo này. Theo lý thuyết xác suất ta có:

$$\bar{A} = \sum_k a_k w_k \text{ đối với trường hợp A có giá trị gián đoạn,} \tag{3.10}$$

$$\overline{A} = \int_a a\rho(a)da \text{ đối với trường hợp A có giá trị liên tục.} \tag{3.11}$$

Theo thuật ngữ của cơ học lượng tử, trị trung bình $\bar{A}$ được gọi là vọng trị của A (expectation value). Ta thấy rằng theo (3.10) và (3.2) thì $\bar{A}$ được xác định duy nhất bởi vectơ trạng thái $|\Psi\rangle$, trị riêng và hàm riêng của toán tử $\hat{A}$. Điều đó có nghĩa là mặc dù ta không thể đo được chính xác các giá trị riêng lẻ của A nhưng ta có thể xác định trị trung bình của nó ở trạng thái $|\Psi\rangle$.

Theo cơ học lượng tử thì trị trung bình của một đại lượng động lực được biểu diễn dưới dạng:

$$\bar{A} = \langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle \quad \text{hay } \bar{A} = \int_V \Psi^*\hat{A}\Psi dV. \tag{3.12}$$

Nếu trạng trạng thái $|\Psi\rangle$ chưa được chuẩn hóa thì (3.12) trở thành

$$\bar{A} = \frac{\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} \quad \text{hay } \bar{A} = \frac{\int_V \Psi^*\hat{A}\Psi dV}{\int_V \Psi^*\Psi dV}. \tag{3.13}$$

Các công thức này nghiệm đúng cho trường hợp đại lượng động lực có giá trị gián đoạn lẫn liên tục. Ta có thể suy ra phương trình (3.12) từ các phương trình (3.10) và (3.11). Chẳng hạn, đối với trường hợp toán tử $\hat{A}$ có phổ trị riêng gián đoạn:

$$\overline{A} = \sum_k a_k w_k = \sum_k a_k |c_k|^2 = \sum_k a_k c_k^* c_k,$$

thay $c_k^* = \langle\psi_k|\Psi\rangle^* = \langle\Psi|\psi_k\rangle$ vào, ta được:

$$\overline{A} = \sum_k a_k \langle\Psi|\psi_k\rangle c_k = \sum_k c_k \langle\Psi|a_k\psi_k\rangle$$
$$= \sum_k c_k \langle\Psi|\hat{A}\psi_k\rangle = \langle\Psi|\hat{A}\sum_k c_k\psi_k\rangle = \langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle.$$

Ví dụ 4.1:

Một hệ có trạng thái được biểu diễn dưới dạng:

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{3}}{3}|\phi_1\rangle + \frac{2}{3}|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}|\phi_3\rangle,$$

trong đó các $|\phi_i\rangle$ thỏa mãn điều kiện trực chuẩn. Tìm xác suất để hệ có thể ở các trạng thái $|\phi_1, |\phi_2\rangle$ hoặc $\phi_3\rangle$.

Lời giải:

+ Hàm $|\psi\rangle$ là hàm chuẩn hóa vì:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{3}\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{4}{9}\langle\phi_2|\phi_2\rangle + \frac{2}{9}\langle\phi_3|\phi_3\rangle = \frac{1}{3} + \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = 1.$$

+ Xác suất tìm hệ ở trạng thái$|\phi_1\rangle$ là:

$$w_1 = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{\sqrt{3}}{3}\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{2}{3}\langle\phi_1|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}\langle\phi_1|\phi_3\rangle\right|^2 = \frac{1}{3}.$$

+ Tương tự, ta tìm được: $w_2 = \frac{4}{9},\ w_3 = \frac{2}{9}$.

+ Có thể nghiệm lại rằng tổng các xác suất bằng 1:

$$w_1 + w_2 + w_3 = \frac{3}{9} + \frac{4}{9} + \frac{2}{9} = 1.$$

Ví dụ 4.2:

Trạng thái của một hệ được khai triển dưới dạng tổ hợp các hàm trực chuẩn $|\phi_n\rangle$ với $n = 1, 2, 3, 4, 5$ như sau:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{19}}|\phi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{19}}|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{19}}|\phi_3\rangle + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{19}}|\phi_4\rangle + \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{19}}|\phi_5\rangle, \tag{3.14}$$

trong đó ϕ_n là hàm riêng của toán tử Hamilton của hệ thỏa mãn phương trình trị riêng: $\hat{H}|\phi_n\rangle = n\varepsilon_0|\phi_n\rangle$, trong đó $n = 1, 2, 3, 4, 5$ và ε_0 có thứ nguyên của năng lượng.

a) Tìm xác suất để đo năng lượng của hệ

b) Tìm trị trung bình trong phép đo năng lượng của hệ.

Lời giải

Trước hết ta nhận xét rằng trạng thái $|\psi\rangle$ là không chuẩn hóa. Thật vậy:

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle &= \frac{1}{19}\langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{4}{19}\langle\phi_2|\phi_2\rangle + \frac{2}{19}\langle\phi_3|\phi_3\rangle + \frac{3}{19}\langle\phi_3|\phi_3\rangle + \frac{5}{19}\langle\phi_5|\phi_5\rangle \\ &= \frac{1}{19} + \frac{4}{19} + \frac{2}{19} + \frac{3}{19} + \frac{5}{19} = \frac{15}{19} \neq 1.\end{aligned}$$

a) Gọi E_n là năng lượng của hệ ứng với hàm riêng ϕ_n thì ta có $E_n = n\varepsilon_0$. Như vậy, các giá trị khả dĩ của năng lượng của hệ là $E_1 = \varepsilon_0, E_2 = 2\varepsilon_0, E_3 = 3\varepsilon_0, E_4 = 4\varepsilon_0, E_5 = 5\varepsilon_0$. Các xác suất tương ứng với giá trị năng lượng này là:

$$\begin{aligned}w_1(E_1) &= \frac{|\langle\phi_1|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\frac{1}{\sqrt{19}}\langle\phi_1|\phi_1\rangle\right|^2 .\frac{19}{15} = \frac{1}{15}, \\ w_2(E_2) &= \frac{|\langle\phi_2|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\frac{2}{\sqrt{19}}\langle\phi_2|\phi_2\rangle\right|^2 .\frac{19}{15} = \frac{4}{15}, \\ w_3(E_3) &= \frac{|\langle\phi_3|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{19}}\langle\phi_3|\phi_3\rangle\right|^2 .\frac{19}{15} = \frac{2}{15},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}w_4(E_4) &= \frac{|\langle\phi_4|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{19}}\langle\phi_4|\phi_4\rangle\right|^2 .\frac{19}{15} = \frac{3}{15}, \\ w_5(E_5) &= \frac{|\langle\phi_5|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left|\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{19}}\langle\phi_5|\phi_5\rangle\right|^2 .\frac{19}{15} = \frac{5}{15}.\end{aligned}$$

b) Trị trung bình của năng lượng của hệ được tính theo hai cách:

\+ Cách 1: Dùng công thức tính trị trung bình theo lý thuyết xác suất :

$$E = \sum_{i=1}^{5} w_i E_i = \frac{1}{15}\varepsilon_0 + \frac{8}{15}\varepsilon_0 + \frac{6}{15}\varepsilon_0 + \frac{12}{15}\varepsilon_0 + \frac{25}{15}\varepsilon_0 = \frac{52}{15}\varepsilon_0. \tag{3.15}$$

+ Cách 2: Dùng công thức tính trị trung bình theo cơ lượng tử :

$$\begin{aligned}
E &= \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{19}{15}\left(\frac{1}{\sqrt{19}}\langle\phi_1| + \frac{2}{\sqrt{19}}\langle\phi_2| + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{19}}\langle\phi_3| + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{19}}\langle\phi_4| + \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{19}}\langle\phi_5|\right) \\
&\quad \Big|\hat{H}\left(\frac{1}{\sqrt{19}}|\phi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{19}}|\phi_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{19}}|\phi_3\rangle + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{19}}|\phi_4\rangle + \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{19}}|\phi_5\rangle\right) \\
&= \frac{19}{15}\left(\frac{1}{19} + \frac{4}{19}2 + \frac{2}{19}3 + \frac{3}{19}4 + \frac{5}{19}5\right)\varepsilon_0 = \frac{52}{15}\varepsilon_0.
\end{aligned}$$

§ 5 SỰ ĐO ĐỒNG THỜI CÁC ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC

5.1 KHÁI NIỆM HÀM RIÊNG CHUNG

Theo Tiên đề III, nếu đo đại lượng động lực A ở trạng thái $\psi = \psi_a$ thì ta được giá trị a với $\rho(a) = 1$, lúc đó ta nói đại lượng động lực A đo được hoàn toàn chính xác hay hoàn toàn được xác định. Tương tự, nếu ta đo đại lượng động lực B ở trạng thái $\psi = \psi_b$ thì đại lượng động lực B đo được hoàn toàn chính xác ($\rho(b) = 1$). Như vậy, nếu khi $\psi = \psi_a = \psi_b$, nghĩa là khi hai toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ có hàm riêng trùng nhau, ta nói chúng có hàm riêng chung (common eigenfunction) thì các đại lượng động lực A và B có giá trị đồng thời được xác định.

5.2 ĐIỀU KIỆN ĐỂ HAI ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC ĐỒNG THỜI ĐƯỢC XÁC ĐỊNH

Ta có định lý sau: *Điều kiện ắt có và đủ để hai đại lượng động lực đồng thời được xác định là các toán tử tương ứng với chúng giao hoán với nhau*

Chứng minh:

(1) Điều kiện ắt có: Ta sẽ chứng minh rằng nếu $\psi_a = \psi_b$ thì $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Đặt $\psi_a = \psi_b = \psi_c$, phương trình trị riêng của hai toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ là:

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a, \tag{3.16}$$

$$\hat{B}\psi_b = b\psi_b. \tag{3.17}$$

Ta tác dụng toán tử $\hat{B}$ lên 2 vế của (3.16) và toán tử $\hat{A}$ lên 2 vế của (3.17) rồi thay ψ_a và ψ_b bằng ψ_c, ta được:

$$\hat{B}\hat{A}\psi_c = a\hat{B}\psi_c = ab\psi_c, \tag{3.18}$$

$$\hat{A}\hat{B}\psi_c = b\hat{A}\psi_c = ba\psi_c. \tag{3.19}$$

Trừ hai phương trình trên theo từng vế, ta được:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi_c = (ba - ab)\psi_c.$$

Hay:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 0 \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0.$$

(2) Điều kiện đủ: Ta chứng minh rằng nếu $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ thì $\psi_a = \psi_b$.
Đặt $\psi_a = \varphi$, phương trình trị riêng của $\hat{A}$ là:

$$\hat{A}\varphi = a\varphi. \tag{3.20}$$

Tác dụng toán tử $\hat{B}$ lên 2 vế của (3.20):

$$\hat{B}\hat{A}\varphi = a\hat{B}\varphi.$$

Thay $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$ vào, ta được:

$$\hat{A}\hat{B}\varphi = a\hat{B}\varphi. \tag{3.21}$$

Đặt $\hat{B}\varphi = \Phi$, phương trình (3.21) trở thành:

$$\hat{A}\Phi = a\Phi. \tag{3.22}$$

So sánh 2 phương trình (3.20) và (3.22), ta được: $\varphi \equiv \Phi$, hay $\Phi = \mathbb{C}\varphi$.
Nếu chọn $\mathbb{C} = b$ thì: $\Phi = \hat{B}\varphi = b\varphi \Rightarrow \hat{B}\psi_b = b\psi_b$. Vậy: $\varphi = \psi_a = \psi_b$.

§ 6 HỆ THỨC BẤT ĐỊNH HEISENBERG

Hệ thức bất định được Heisenberg thành lập năm 1927. Hệ thức này chỉ ra rằng ta không thể xác định đồng thời chính xác tọa độ và xung lượng của hạt vi mô. Nói cách khác, nếu tọa độ đo được càng chính xác thì xung lượng (vận tốc) của hạt càng không đo được chính xác. Hệ quả trực tiếp của vấn đề này là hạt vi mô không có quỹ đạo xác định. Đây là ý nghĩa vật lý cực kỳ quan trọng của hệ thức bất định Heisenberg trong cơ học lượng tử. Hệ thức bất định Heisenberg là một nguyên lý quan trọng của cơ học lượng tử và được trình bày trong các sách về vật lý lượng tử và cơ học lượng tử. Tuy nhiên, phụ thuộc vào ý đồ của từng tác giả và mức độ chuyên sâu của vấn đề mà hệ thức này được thành lập theo nhiều cách khác nhau. Dưới đây sẽ trình bày cách xây dựng có tính chất tổng quát nhất về hệ thức bất định Heisenberg.

6.1 ĐỘ BẤT ĐỊNH TRONG PHÉP ĐO MỘT ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC

Trong cơ học lượng tử, nói chung khi đo một đại lượng động lực ở trạng thái $\psi \neq \psi_a$ thì giá trị thu được của A có tính xác suất, ta nói ta gặp phải một *độ không chính xác* hay *độ bất định* trong phép đo A. Độ bất định này chính là căn bậc hai của phương sai DA

$$(\Delta A) = \sqrt{DA} = \sqrt{\overline{(\Delta A)^2}}. \tag{3.23}$$

ΔA được gọi là độ bất định trong phép đo đại lượng động lực A. Đại lượng này trong cơ học lượng tử mô tả độ không chính xác của phép đo hay là độ bất định của phép đo [2].

[2] Một số tài liệu dùng các ký hiệu khác để chỉ độ bất định, chẳng hạn: $\sigma(A), \delta A$.

6.2 HỆ THỨC BẤT ĐỊNH TRONG PHÉP ĐO HAI ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC

Trong trường hợp tổng quát nếu hai toán tử $\hat{A}$ và $\hat{B}$ tương ứng với hai đại lượng động lực A và B không giao hoán thì phép đo A và B không cho giá trị hoàn toàn xác định mà có các độ bất định (uncertainty) (ΔA) và (ΔB). Các độ bất định này không phải bất kỳ mà có sự liên hệ với nhau. Ta sẽ thiết lập hệ thức liên hệ giữa hai độ bất định này. Giả sử $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, trong đó $\hat{C}$ là toán tử Hermite khác không.

Ta đưa ra hai toán tử độ lệch:

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \bar{A}; \quad \Delta\hat{B} = \hat{B} - \bar{B}.$$

Dễ dàng chứng minh được rằng:

$$[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}.$$

Để thành lập hệ thức liên hệ giữa (ΔA) và (ΔB), ta xét tích phân:

$$I(\alpha) = \int_V \left|(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi\right|^2 dV, \tag{3.24}$$

trong đó α là một hằng số thực. Ta viết lại (3.24) dưới dạng tích vô hướng như sau:

$$I(\alpha) = \langle(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi|(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi\rangle. \tag{3.25}$$

Theo tính chất của tích vô hướng trong không gian Hilbert thì ta phải có $I(\alpha) \geq 0$. Sử dụng tính chất Hermite của toán tử $\Delta\hat{A}$ và $\Delta\hat{B}$ ta được:

$$I(\alpha) = \langle\psi|(\alpha\Delta\hat{A} + i\Delta\hat{B})(\alpha\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B})\psi\rangle. \tag{3.26}$$

Qua một số phép biến đổi ta được

$$I(\alpha) = \langle\psi|(\alpha^2(\Delta\hat{A})^2 + (\Delta\hat{B})^2 - i\alpha[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}])\psi\rangle.$$

Từ $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ ta suy ra:

$$I(\alpha) = \langle\psi|(\alpha^2(\Delta\hat{A})^2 + (\Delta\hat{B})^2 + \alpha\hat{C})\psi\rangle.$$

Theo định nghĩa của trị trung bình thì:

$$I(\alpha) = \alpha^2\overline{(\Delta\hat{A})^2} + \alpha\overline{C} + \overline{(\Delta\hat{B})^2}.$$

Điều kiện $I(\alpha) \geq 0$ cho ta bất đẳng thức:

$$(\overline{C})^2 - 4\overline{(\Delta A)^2(\Delta B)^2} \leq 0.$$

Hay:

$$\overline{(\Delta A)^2(\Delta B)^2} \geq (\overline{C})^2/4. \tag{3.27}$$

Lấy căn bậc hai 2 vế của phương trình trên ta được:

$$\sqrt{\overline{(\Delta A)^2}}\sqrt{\overline{(\Delta B)^2}} \geq \frac{1}{2}\overline{C}. \tag{3.28}$$

Theo ký hiệu ở (3.23) thì:

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}\overline{C}. \tag{3.29}$$

Đây chính là hệ thức bất định cho 2 đại lượng động lực có toán tử tương ứng không giao hoán. Như vậy, trong phép đo hai đại lượng động lực có toán tử tương ứng không giao hoán thì độ bất định trong phép đo của chúng liên hệ với nhau theo hệ thức (3.29).

6.3 HỆ THỨC BẤT ĐỊNH GIỮA TOẠ ĐỘ VÀ XUNG LƯỢNG

Ta xét trường hợp phép đo đồng thời toạ độ và xung lượng. Vì hai toán tử tương ứng với toạ độ và xung lượng là không giao hoán $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ nên toạ độ và xung lượng không đồng thời được xác định. Phép đo hai đại lượng này gặp phải các độ bất định liên hệ nhau theo hệ thức (3.29) trong đó ta thay $\hat{A} = \hat{x}; \hat{B} = \hat{p}_x; \hat{C} = \hbar$

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{1}{2}\hbar. \tag{3.30}$$

Hệ thức này do Heisenberg tìm được bằng thực nghiệm năm vào 1927 [3] và được gọi là hệ thức bất định Heisenberg. Hệ thức này có một ý nghĩa vật lý cực kỳ quan trọng, đó là: *hạt vi mô không có quỹ đạo xác định*. Thật vậy, vì tọa độ và xung lượng của hạt vi mô không đồng thời đo được chính xác nên nếu giả sử tọa độ được xác định một cách chính xác: $(\Delta x) = 0$, thì xung lượng sẽ hoàn toàn bất định:$(\Delta p_x) = \infty$. Điều đó có nghĩa là tọa độ và xung lượng (vận tốc) của hạt vi mô không được xác định đồng thời chính xác, vì vậy không thể xác định được quỹ đạo của nó.

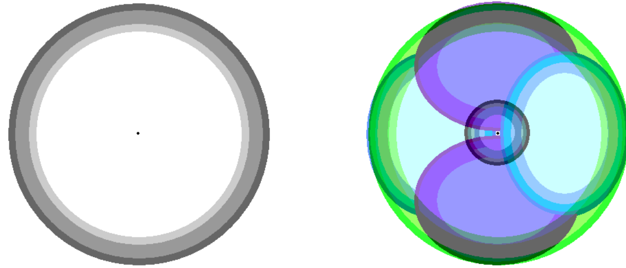
Như vậy có thể coi hệ thức bất định là biểu thức toán học nói lên sự tồn tại của lưỡng tính sóng hạt của các đối tượng vi mô. Đó là một quy luật khách quan, phản ánh tính chất khách quan của hạt vi mô mà không liên quan gì đến những hạn chế của phép đo. Quan điểm này đã đánh tan những quan điểm duy tâm, siêu hình cho rằng nhận thức của con người là có hạn, con người không thể tạo ra những dụng cụ đủ chính xác để tìm hiểu các tính chất của các đối tượng vi mô (thuyết bất khả tri).

Ta có thể lấy chuyển động của electron trong nguyên tử Hydro làm ví dụ. Theo lý thuyết Bohr, electron được coi như là một hạt chuyển động xung quanh hạt nhân theo những quỹ đạo dừng (quỹ đạo đã được lượng tử hóa). Trong phạm vi cơ học lượng tử, do sự quy định của hệ thức bất định Heisenberg, ta không thể nói về chuyển động của electron theo quỹ đạo nữa. Ta chỉ có thể nói về xác suất tìm thấy electron tại một miền không gian nào đó quanh hạt nhân. Điều này không làm hạn chế nhận thức của ta về electron.

Sự phân bố xác suất các tọa độ của electron trong nguyên tử Hydro sẽ được nghiên cứu ở Chương VI, ở đây ta chỉ chú ý rằng có một xác suất xác định để electron nằm khá xa và khá gần hạt nhân. Khoảng cách đến quỹ đạo Bohr thứ nhất là khoảng cách có xác suất cực đại ở trạng thái cơ bản. Kết luận này đã được xác nhận bằng thực nghiệm. Nhiều phép đo đã được tiến hành để tìm sự

[3] Thật ra, Heisenberg đã dựa vào thí nghiệm nhiễu xạ của electron để xác định độ không chính xác (sai số) trong phép đo toạ độ và xung lượng của electron và đưa ra hệ thức: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$

phân bố mật độ của đám mây electron trong nguyên tử và kết quả tìm thấy rất phù hợp với những tiên đoán của cơ học lượng tử. Ngoài hệ thức bất định giữa



Hình 3.1: Đám mây điện tử của electron trong a) nguyên tử Hydro, b) nguyên tử Carbon.

toạ độ và xung lượng, ta còn có hệ thức bất định giữa các cặp đại lượng khác có toán tử tương ứng không giao hoán.

Ví dụ:

(i) Hệ thức giữa góc φ và hình chiếu của mômen xung lượng lên trục z:

Do hệ thức $[\varphi, \hat{L}_z] = i\hbar$ hệ thức bất định giữa góc φ của các hạt và hình chiếu của mômen xung lượng lên phương vuông góc với mặt phẳng của góc φ:

$$(\Delta\varphi)(\Delta L_z) \geq \frac{1}{2}\hbar. \tag{3.31}$$

Hệ thức này có ý nghĩa là nếu cho trước góc φ thì hình chiếu của mômen xung lượng lên trục z sẽ hoàn toàn không xác định. Ngược lại, nếu ta đặc trưng chuyển động của hạt bằng hình chiếu của mômen xung lượng lên trục z thì không thể nói gì về vị trí góc xác định của hạt.

(ii) Hệ thức bất định giữa năng lượng và thời gian:

$$(\Delta E)(\Delta t) \geq \frac{1}{2}\hbar. \tag{3.32}$$

Người ta thường biểu diễn hệ thức (3.32) dưới dạng

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2}\hbar. \tag{3.33}$$

Hệ thức này có ý nghĩa như sau:

- Nếu trạng thái của hạt có năng lượng càng xác định (ΔE càng nhỏ) thì thời

gian sống của nó càng lâu (Δt lớn), Ngược lại, nếu trạng thái của hạt có năng lượng càng bất định (ΔE càng lớn) thì thời gian sống của nó càng ngắn (Δt bé). Nói riêng, trạng thái có năng lượng xác định (trạng thái dừng) là trạng thái có thời gian sống vô hạn ($\Delta t = \infty$).
- Nếu hạt ở trạng thái kích thích trong khoảng thời gian Δt thì độ bất định về năng lượng là ΔE.
- Khi đo năng lượng trong khoảng thời gian Δt thì gặp phải một sai số là ΔE.

Cuối cùng, ta cần lưu ý rằng biểu thức (3.27) hoặc (3.29) trong vật lý thường được gọi là hệ thức bất định Heisenberg, mặc dầu về mặt lịch sử hệ thức bất định Heisenberg chỉ liên quan đến toạ độ và xung lượng.

§ 7 TÓM TẮT CHƯƠNG 3

- Các tiên đề cơ bản trong cơ lượng tử đặt tương ứng các công cụ toán học và các khái niệm vật lý trong quá trình xây dựng cơ lượng tử.

- Tiên đề 1 đặt tương ứng một phần tử của không gian Hilbert với trạng thái của hệ vi mô. Mọi thông tin về hệ đều chứa trong hàm trạng thái này. Vì vậy, việc tìm dạng của hàm này là một trong các nhiệm vụ cơ bản của cơ lượng tử.

- Tiên đề 2 đặt tương ứng một đại lượng động lực với một toán tử tuyến tính và Hermite tác dụng trong không gian Hilbert của các hàm trạng thái. Phương trình trị riêng của toán tử diễn tả một phép đo trong cơ lượng tử. Trị riêng của toán tử ứng với giá trị đo được, hàm riêng của toán tử ứng với trạng thái sau khi đo.

- Tiên đề 3 nói lên tính chất thống kê trong cơ học lượng tử. Đó chính là cách tìm xác suất để đo một đại lượng động lực trong cơ lượng tử. Xác suất để khi đo đại lượng động lực A ở trạng thái ψ được giá trị a_k được tính theo công thức $w(a_k) = \langle \psi_k | \psi \rangle$, trong đó ψ_k thỏa mãn phương trình

trị riêng: $\hat{A}\psi_k = a_k\psi_k$. Nếu đại lượng động lực có giá trị liên tục thì khái niệm xác suất được thay bằng mật độ xác suất.

- Trị trung bình trong phép đo một đại lượng động lực ở trạng thái Ψ chính là hệ quả trực tiếp của tiên đề 3: $\bar{A} = \langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle$. Điều cần lưu ý là công thức tính trị trung bình không phụ thuộc vào đại lượng động lực gián đoạn hay liên tục và chứa hàm trạng thái.

- Hệ thức giao hoán của toán tử có ý nghĩa vật lý cực kỳ quan trọng vì nó liên quan đến tính chất bất định trong phép đo một đại lượng động lực. Nếu hai toán tử giao hoán thì hai đại lượng động lực tương ứng được xác định đồng thời chính xác và giá trị của phép đo không phụ thuộc vào thứ tự của phép đo. Ngược lại nếu hai toán tử không giao hoán (còn gọi là không tương thích) thì hai đại lượng động lực tương ứng không đo được đồng thời chính xác, nghĩa là phép đo chúng gặp phải các độ bất định (độ không chính xác) nào đó, xác định bởi hệ thức bất định Heisenberg: $(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{1}{2}\overline{C}$. Ý nghĩa vật lý trực tiếp của hệ thức này là hạt vi mô không có quỹ đạo xác định.

§ 8 BÀI TẬP CHƯƠNG 3

1. Hạt ở trạng thái được mô tả bởi hàm sóng $\psi(x) = Ax(L-x)$, trong đó: $0 \leq x \leq L$. Hãy tìm động năng trung bình của hạt.

2. Hạt ở trạng thái được mô tả bởi hàm sóng:

   $\psi(x) = A\exp(ikx - \alpha^2x^2)$, trong đó: $-\infty \leq x \leq \infty$, a và k là các hằng số

   Hãy tìm các giá trị trung bình: $\overline{x}; \overline{p_x}, \overline{(\triangle x)^2}; \overline{(\triangle p_x)^2}$ và nghiệm lại hệ thức bất định.

3. Tình trị trung bình của góc φ và L_z đối với hệ ở trạng thái: $\psi(\varphi) = A\sin\varphi$.

4. Tìm các trị riêng khả dĩ của toán tử $\hat{L_z}$ và xác suất đo các trị riêng ấy đối với hạt ở trạng thái $\psi(\varphi) = A\sin^2\varphi$. Từ đó hãy tính trị trung bình $\overline{L_z}$ và $\overline{L_z^2}$

5. Chứng minh trị trung bình của bình phương 1 đại lượng vật lý là dương.

6. Cho hạt ở trạng thái $\psi(x) = \varphi(x)\exp(ip_0x/\hbar)$. Chứng minh rằng $\overline{p_x} = p_0$ nếu $\varphi(x)$ là hàm thực.

7. Chứng tỏ rằng ở trạng thái $\psi = \psi_m$ với ψ_m là hàm riêng của toán tử $\hat{L_z}$ thì trị trung bình của L_x và L_y bằng không.

8. Chứng tỏ rằng trị trung bình của x ở trạng thái $\psi(x)$ bằng giá trị của a để cho biểu thức $V(a) =< \psi(x+a)|x^2\psi(x+a) >$ là cực tiểu và có giá trị cực tiểu là $V_{min} = \bar{x^2} - (\bar{x})^2$.

9. Một hệ ở trạng thái $|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{7}}|\phi_1\rangle + \sqrt{\frac{3}{7}\phi_2\rangle} + \sqrt{\frac{1}{7}\phi_3\rangle} + \sqrt{\frac{1}{7}\phi_4\rangle}$, trong đó $|\phi_n\rangle$ là hàm riêng của toán tử Hamilton ứng với trị riêng $n^2\varepsilon_0$.

   a) Tìm các xác suất đo các giá trị năng lượng khả dĩ của hệ.

   b) Xét toán tử $\hat{A}$ tác dụng lên hàm ϕ_n được mô tả bởi phương trình $\hat{A}|\phi_n\rangle = (n+1)a_0|\phi_n\rangle$. Tìm các giá trị khả dĩ trong phép đo đại lượng động lực A và các xác suất tương ứng.

   c) Giả sử rằng phép đo năng lượng cho giá trị $4\varepsilon_0$. Nếu ta đo đại lượng động lực A liền sau đó thì ta nhận được giá trị nào?

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. a) Dùng điều kiện chuẩn hoá để tìm hệ số A:

$$|A|^2\int_0^L x^2(L-x)^2dx = 1,$$

tính ra ta được $A = \sqrt{\dfrac{30}{L^5}}$.
b) Động năng trung bình:

$$\overline{T} = \langle\psi|\hat{T}\psi\rangle = |A|^2 \int_0^L (Lx - x^2)\hat{T}(Lx - x^2)dx,$$

trong đó $\hat{T} = \hat{p_x^2}/2m$.
Thay toán tử $\hat{p_x^2} = -\hbar^2 \dfrac{d^2}{dx^2}$ và tính tích phân ta được:

$$\overline{T} = 5\hbar^2/mL^2.$$

2. a) Từ điều kiện chuẩn hoá, ta tính được $A^2 = \alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}$.
b) + Từ công thức tính trị trung bình thay $\hat{x} = x$, ta được:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{x}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\psi^*(x)\psi(x)dx,$$

sử dụng tích phân Poisson ta tính được: $\overline{x} = 0$
+ Dùng công thức tính trị trung bình: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{x}^2\psi(x)dx$, thay $\hat{x}^2 = x^2$, rồi áp dụng tích phân Poisson ta tính được $\overline{x^2} = \dfrac{1}{4\alpha^2}$
b) Tương tự, tính trị trung bình của p_x và p_x^2, ta được:

$$\overline{p_x} = \hbar k \;\text{ và }\; \overline{p_x^2} = \hbar^2 k^2 + \alpha^2\hbar^2.$$

c) $\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - (\overline{x})^2 = \frac{1}{4\alpha^2}$, $\quad \overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - (\overline{p_x})^2 = \hbar^2\alpha^2$.
Từ đó $\overline{(\Delta x)^2}\ \overline{(\Delta p_x)^2} = \hbar^2/4 \rightarrow$ nghiệm đúng hệ thức bất định.

3. a) Chuẩn hoá để tìm A:

$$|A|^2 \int_0^{2\pi} \sin^2\varphi d\varphi = 1, \text{ tính ra ta được: } A = \frac{1}{\sqrt{\pi}}.$$

b) Dùng công thức tính trị trung bình:

$$\overline{\varphi} = \int_0^{2\pi} \sin\varphi\hat{\varphi}\sin\varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \varphi\sin^2\varphi d\varphi.$$

Sử dụng công thức hạ bậc lũy thừa $\sin^2 x = \dfrac{1-\cos 2x}{2}$ và tính ra ta được $\overline{\varphi} = \pi$.

b) Dùng công thức tính trị trung bình:

$$\overline{L_z} = \int_0^{2\pi} \sin\varphi \hat{L}_z \sin\varphi d\varphi = (-i\hbar)\int_0^{2\pi} \sin\varphi \frac{d}{d\varphi}\sin\varphi d\varphi,$$

tính ra ta được $\hat{L}_z = 0$.

4. a) Dùng điều kiện chuẩn hoá để tìm hệ số A:

$$|A|^2 \int_0^{2\pi} (\sin^2\varphi)^2 d\varphi = 1$$

Sử dụng công thức hạ bậc lũy thừa $\sin^2 x = \dfrac{1-\cos 2x}{2}$ và tính ra ta được: $A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}$

b) Dùng công thức tính xác suất đo L_z: $w_m = |c_m|^2$, trong đó: $c_m = \langle\psi_m|\psi\rangle$. $\psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$ là hàm riêng của toán tử $\hat{L}_z$.

Tính hệ số $c_m = \dfrac{A}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}\sin^2\varphi d\varphi$. Sử dụng khai triển:

$$\sin\varphi = \frac{(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})}{2i}$$

và điều kiện trực chuẩn của hàm riêng toán tử $\hat{L}_z$:

$$\langle\psi_m|\psi_{m'}\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi}d\varphi = \delta_{mm'},$$

tính ra ta được:

$$c_m = \frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}\Big(\frac{1}{2i}(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})\Big)^2 d\varphi,$$

hay

$$c_m = \frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi} \Big(2e^{i(0-m)\varphi} - e^{i(2-m)\varphi} - e^{i(-2-m)\varphi}\Big)\Big)d\varphi,$$

từ đó:

$$c_m = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}}(2\delta_{m,0} - \delta_{m,2} - \delta_{m,-2}).$$

Các giá trị khả dĩ của m là:

$$\begin{cases} m = 0, & \text{ứng với giá trị của } L_z = 0\hbar, \\ m = 2, & \text{ứng với giá trị của } L_z = 2\hbar, \\ m = -2, & \text{ứng với giá trị của } L_z = -2\hbar. \end{cases}$$

Xác suất tương ứng với các giá trị $L_z = m\hbar$ là

$$\begin{cases} L_z = 0\hbar & \text{xác suất tương ứng là} w_0 = |c_0|^2 = 2/3, \\ L_z = 2\hbar & \text{xác suất tương ứng là} w_2 = |c_2|^2 = 1/6, \\ L_z = -2\hbar & \text{xác suất tương ứng là} w_{-2} = |c_{-2}|^2 = 1/6. \end{cases}$$

c) Trị trung trung bình của L_z có thể tính theo công thức:

$$\overline{L_z} = \sum_{m=0,2,-2} (m\hbar) w_m = 0.(2/3) + 2\hbar(1/6) - 2\hbar(1/6) = 0.$$

d) Tương tự trị trung trung bình của L_z^2 là:

$$\overline{L_z^2} = \sum_{m=0,2,-2} (m\hbar)^2 w_m = 0 + (2\hbar)^2(1/6) + (-2\hbar)^2(1/6) = \frac{4\hbar^2}{3}.$$

5. Dùng biểu thức định nghĩa trị trung bình: $\overline{A^2} = \langle\psi|\hat{A}^2\psi\rangle$, ta được:

$$\overline{A^2} = \langle\psi|\hat{A}^2\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}\hat{A}\psi\rangle \xrightarrow{\text{vì } \hat{A} \text{ là Hermitic}} = \langle\hat{A}\psi|\hat{A}\psi\rangle$$

Tích vô hướng $\langle\hat{A}\psi|\hat{A}\psi\rangle$ luôn luôn dương, vì vậy $\overline{A^2} \geq 0$.

6. Dùng công thức tính trị trung bình:

$$\begin{aligned} \overline{p_x} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Big(\varphi(x) e^{(ip_o x/\hbar)}\Big)^* \hat{p_x} \varphi(x) e^{i(p_o x/\hbar)} dx \\ &= (-i\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) e^{-ip_o x/\hbar} \frac{d}{dx} \varphi(x) e^{\frac{i}{\hbar} p_o x} dx. \end{aligned}$$

Tính đạo hàm: $\dfrac{d}{dx}\varphi(x) e^{\frac{i}{\hbar}p_o x} = \dfrac{d\varphi(x)}{dx} e^{\frac{i}{\hbar}p_o x} + \varphi(x)\dfrac{i}{\hbar} p_o e^{\frac{i}{\hbar}p_o x}$,
thay vào biểu thức trên, ta được:

$$\overline{p_x} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}p_o x} \Big(\frac{d\varphi(x)}{dx} e^{\frac{i}{\hbar}p_o x} + \varphi(x)\frac{i}{\hbar} p_o e^{\frac{i}{\hbar}p_o x}\Big) dx$$

Thực hiện phép tính trên và sử dụng điều kiện chuẩn hóa:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\varphi(x)e^{(ip_ox/\hbar)}\right)^*\varphi(x)e^{i(p_ox/\hbar)}dx = 1 \qquad \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty}(\varphi(x))^2dx = 1,$$

ta chứng minh được: $\overline{p}_x = p_0$.

7. a) Dùng công thức tính trị trung bình: $\overline{L}_x = \langle\psi|\hat{L}_x\psi\rangle$
Sử dụng công thức: $\hat{L}_x = \frac{1}{i\hbar}[\hat{L}_y, \hat{L}_z]$ và $\psi = \psi_m$ ta được:

$$\overline{L}_x = \langle\psi|\hat{L}_x\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi_m|[\hat{L}_y, \hat{L}_z]\psi_m\rangle = \frac{1}{i\hbar}\big(\langle\psi_m|\hat{L}_y\hat{L}_z\psi_m\rangle - \langle\psi_m|\hat{L}_z\hat{L}_y\psi_m\rangle.$$

Sử dụng tính chất Hermite của toán tử $\hat{L}_y$ và $\hat{L}_z$ và phương trình trị riêng của tóan tử $\hat{L}_z$: $\hat{L}_z\psi_m = m\hbar\psi_m$, ta chứng minh được $\overline{L}_x = 0$.
b) Tương tự như phần a), dùng công thức tính trị trung bình: $\overline{L}_y = \langle\psi|\hat{L}_y\psi\rangle$. Sử dụng công thức: $\hat{L}_y = \frac{1}{i\hbar}[\hat{L}_z, \hat{L}_x]$ và $\psi = \psi_m$ và tiến hành tính toán như phần a) ta chứng minh được $\overline{L}_y = 0$.

8. Thay $x = x - a$ vào biểu thức $V(a) = \langle\psi(x+a)|x^2\psi(x+a)\rangle$ rồi tính toán ta được:

$$V(a) = \overline{x^2} - 2a\bar{x} + a^2.$$

Điều kiện để $V(a)$ cực tiểu là $dV(a)/da = 0$ cho ta $a = \bar{x}$, vì vậy giá trị cực tiểu của $V(a)$ là:

$$V_{min} = V(\bar{x}) = \overline{x^2} - (\bar{x})^2 = (\Delta x)^2.$$

9. a) Các giá trị khả dĩ của năng lượng là:

$$E_1 = \varepsilon_0,\ E_2 = 4\varepsilon_0,\ E_3 = 9\varepsilon_0,\ E_4 = 16\varepsilon_0.$$

Hàm ψ chính là khai triển của các hàm riêng ϕ_n: $|\psi\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle$, trong đó $c_n = \sqrt{\frac{2}{7}},\ \sqrt{\frac{3}{7}},\ \sqrt{\frac{1}{7}},\ \sqrt{\frac{1}{7}}$. Vì vậy xác suất đo các giá trị tương ứng của năng lượng là:

$$w_n = |c_n|^2 = |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2/\langle\psi|\psi\rangle.$$

Vì $\langle\psi|\psi\rangle = (2+3+1+1)/7 = 1$ nên:

$$\begin{aligned} w_1 &= \left|\sqrt{\frac{2}{7}\langle\phi_1|\phi_1\rangle}\right|^2 = \frac{2}{7}, \quad w_2 = \left|\sqrt{\frac{3}{7}\langle\phi_2|\phi_2\rangle}\right|^2 = \frac{3}{7} \\ w_3 &= \left|\sqrt{\frac{1}{7}\langle\phi_3|\phi_3\rangle}\right|^2 = \frac{1}{7}, \quad w_4 = \left|\sqrt{\frac{1}{7}\langle\phi_4|\phi_4\rangle}\right|^2 = \frac{1}{7}. \end{aligned}$$

b) Các trị khả dĩ của toán tử $\hat{A}$ là:

$$a_1 = 2a_0,\ a_2 = 3a_0,\ a_3 = 4_0,\ a_4 = 5a_0.$$

Tính như trường hợp phần a) ta được các xác suất để đo các giá trị $a_1,\ a_2,\ a_3,\ a_4$ lần lượt là:

$$\begin{aligned} w_1 &= \left|\sqrt{\frac{2}{7}\langle\phi_1|\phi_1\rangle}\right|^2 = \frac{2}{7}, \quad w_2 = \left|\sqrt{\frac{3}{7}\langle\phi_2|\phi_2\rangle}\right|^2 = \frac{3}{7} \\ w_3 &= \left|\sqrt{\frac{1}{7}\langle\phi_3|\phi_3\rangle}\right|^2 = \frac{1}{7}, \quad w_4 = \left|\sqrt{\frac{1}{7}\langle\phi_4|\phi_4\rangle}\right|^2 = \frac{1}{7}. \end{aligned}$$

c) Phép đo năng lượng được giá trị $4\varepsilon_0$ nghĩa là hệ đang ở trạng thái ϕ_2. Vì vậy khi thực hiện phép đo đại lượng động lực A liền sau đó thì ta được trị riêng ứng với trạng thái ϕ_2 là $3a_0$.

Chương 4
Phương trình Schrodinder

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là khảo sát sự thay đổi của trạng thái của một hạt vi mô theo thời gian thông qua phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian. Tuy nhiên, phần lớn nội dung của chương dành cho việc giải phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian hay còn gọi là phương trình Schrodinger cho trạng thái dừng. Đây chính là phương trình trị riêng toán tử năng lượng. Chuyển động của hạt trong các trường thế khác nhau sẽ được khảo sát chi tiết và đưa ra các kết quả quan trọng về năng lượng và hàm sóng.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ nắm được cách giải phương trình Schrodinger dừng cho các bài toán kinh điển khác nhau. Sinh viên cũng sẽ hiểu được nguồn gốc của sự liên tục hoặc gián đoạn của phổ năng lượng của hạt. Sinh viên cũng sẽ giải được các bài toán liên quan đến việc tìm năng lượng và hàm sóng và tính xác suất và trị trung bình của các đại lượng động lực tương ứng với hạt vi mô ở một trạng thái đã cho.

§ 1 MỞ ĐẦU

Hàm sóng biểu diễn trạng thái của hạt vi mô là một hàm của tọa độ và thời gian, $\Psi(q,t)$. Vấn đề đặt ra là ta cần có một phương trình để xác định trạng thái của hạt. Phương trình này phải là phương trình có chứa biến số tọa độ

và thời gian và được gọi là phương trình Schrodinger. Cách tốt nhất để đưa ra phương trình này là chấp nhận nó như một tiên đề, được gọi là tiên đề IV. Trong chương này ta sẽ lần lượt khảo sát phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian, phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian, sau đó áp dụng chúng để giải các bài toán cơ bản có tính cách kinh điển trong cơ lượng tử.

§ 2 PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER PHỤ THUỘC THỜI GIAN

Trong cơ học Newton, trạng thái của một hạt được đặc trưng bởi toạ độ và xung lượng. Việc tìm toạ độ và xung lượng tại một thời điểm bất kỳ khi biết giá trị của chúng tại thời điểm ban đầu được cho bởi phương trình chuyển động cổ điển (phương trình của định luật II Newton):

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}. \tag{4.1}$$

Đối với cơ học lượng tử, do lưỡng tính sóng hạt của các đối tượng vi mô nên trạng thái của hạt được đặc trưng bởi hàm sóng hay hàm trạng thái (Tiên đề I). Vì vậy, cần có một phương trình diễn tả diễn biến của hàm trạng thái theo thời gian. Phương trình này được Schrodinger đưa ra năm 1926 và được gọi là phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian (phương trình Schrodinger tổng quát):

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{dt} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r},t)\right)\Psi(\vec{r},t). \tag{4.2}$$

Trong phương trình này ta sử dụng biến không gian là $\vec{r}$ thay cho tọa độ tổng quát q. Phương trình này không chứng minh và được chấp nhận như một trong các tiên đề của cơ học lượng tử và được gọi là Tiên đề IV. Nội dung của tiên đề này như sau:

Sự thay đổi theo thời gian của hàm trạng thái của một hạt (hệ hạt) lượng tử được cho bởi phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian, có dạng:

$$i\hbar\frac{\partial}{dt}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t), \tag{4.3}$$

trong đó: $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}, t)$ là Hamiltonian của hệ.

Phương trình (4.3) là một phương trình vi phân hạng nhất theo thời gian và hạng hai theo không gian. Về nguyên tắc, để tìm nghiệm của phương trình ta phải biết được hàm sóng tại thời điểm ban đầu t_0 (điều kiện đầu) và biết được hàm sóng tại hai vị trí của tọa độ (điều kiện biên). Ta lần lượt xét hai điều kiện này:

(i) Điều kiện đầu: Trong cơ học cổ điển khi giải phương trình chuyển động theo định luật II Newton thì điều kiện đầu là tọa độ và xung lượng tại thời điểm đầu ($x(t_0), p(t_0)$ tại $t = t_0$). Trong cơ học lượng tử, điều kiện đầu cho phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian là hàm trạng thái $\Psi(\vec{r}, t_0)$ tại $t = t_0$.

(ii) Điều kiện biên chính là điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm (theo toạ độ không gian của nó tại các điểm biên - điểm có thế năng gián đoạn). Nói chung, điều kiện biên phụ thuộc vào từng bài toán cụ thể và sẽ được khảo sát chi tiết sau.

§ 3 MẬT ĐỘ DÒNG XÁC SUẤT-SỰ BẢO TOÀN SỐ HẠT

Chúng ta sẽ chứng minh rằng từ phương trình (4.3) ta rút ra định luật bảo toàn số hạt biểu thị bằng phương trình liên tục dạng:

$$\frac{\partial\rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div}\vec{j}(\vec{r}, t) = 0, \tag{4.4}$$

trong đó $\rho(\vec{r}, t)$ là mật độ xác suất tìm hạt tại điểm $\vec{r}$, thời điểm t; $\vec{j}(\vec{r}, t)$ là mật độ dòng xác suất. Để chứng minh hệ thức (4.4) ta dùng (4.3) cùng phương trình liên hiệp phức với nó:

$$-i\hbar\frac{\partial}{dt}\Psi^*(\vec{r}, t) = \hat{H}^*\Psi^*(\vec{r}, t). \tag{4.5}$$

Nhân (4.3) cho $\Psi^*(\vec{r}, t)$ và (4.5) cho $\Psi(\vec{r}, t)$ về bên trái rồi trừ phương trình thứ nhất cho phương trình thứ hai và lưu ý đến tính chất Hermite của toán tử $\hat{H}$ ta thu được:

$$i\hbar\{\Psi^*(\vec{r}, t)\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{dt} + \Psi(\vec{r}, t)\frac{\partial\Psi^*(\vec{r}, t)}{dt}\} = \Psi^*(\vec{r}, t)\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t)\hat{H}\Psi^*(\vec{r}, t),$$

hay

$$i\hbar\frac{\partial}{dt}(\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)) = i\hbar\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{dt} = \Psi^*(\vec{r},t)\hat{H}\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\hat{H}\Psi^*(\vec{r},t).$$

Thay dạng của Hamiltonian $\hat{H}$ vào ta được

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\text{div}(\Psi^*(\vec{r},t)\nabla\Psi(\vec{r},t) - \Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t)). \tag{4.6}$$

Nếu ký hiệu

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi(\vec{r},t)\nabla\Psi^*(\vec{r},t) - \Psi^*\nabla\Psi(\vec{r},t)) \tag{4.7}$$

thì (4.6) có thể viết lại như sau:

$$\frac{\partial\rho(\vec{r},t)}{\partial t} + \text{div}\vec{j}(\vec{r},t) = 0. \tag{4.8}$$

$\vec{j}(\vec{r},t)$ được gọi là vectơ mật độ dòng xác suất, độ lớn của $\vec{j}$ có ý nghĩa như là dòng hạt trung bình đi qua một đơn vị diện tích đặt vuông góc với phương chuyển động trong một đơn vị thời gian. Từ phương trình (4.8) ta có thể suy ra định luật bảo toàn số hạt, biểu thị bằng hệ thức:

$$\frac{d}{dt}\int_\infty \rho dV = 0. \tag{4.9}$$

Thật vậy, lấy tích phân (4.8) theo thể tích hữu hạn V rồi áp dụng định lý Gauss, ta được

$$\frac{d}{dt}\int_V \rho dV = -\int_V \text{div}\vec{j}dV = -\oint_S j_n dS. \tag{4.10}$$

Nếu lấy tích phân trong toàn bộ không gian ($V \to \infty$) và chú ý rằng hàm sóng $\Psi \to 0$ ở xa vô cùng, nghĩa là $|\vec{j}| \to 0$, ta nhận được phương trình (4.9). Phương trình này có ý nghĩa là xác suất tìm hạt trong toàn bộ không gian không phụ thuộc thời gian, điều đó có nghĩa là số hạt được bảo toàn (hạt không tự sinh ra cũng không tự biến mất).

§ 4 PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER KHÔNG PHỤ THUỘC THỜI GIAN

Ta khảo sát trường hợp khi không có trường ngoài biến thiên thì toán tử Hamilton không phụ thuộc tường minh vào thời gian và trùng với toán tử năng lượng. Khi đó phương trình (4.3) có nghiệm quan trọng, nhận được bằng phương pháp phân ly biến số:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) f(t). \tag{4.11}$$

Thay (4.11) vào (4.3) ta được:

$$\frac{i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t}}{f(t)} = \frac{\hat{H}\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} = \lambda = \text{const.} \tag{4.12}$$

Từ (4.12) ta được hai phương trình

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = \lambda f(t), \tag{4.13}$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \lambda \psi(\vec{r}). \tag{4.14}$$

Phương trình (4.14) chính là phương trình cho hàm riêng và trị riêng của toán tử năng lượng. Vì vậy $\lambda = E$, với E là trị riêng của toán tử năng lượng $\hat{H}$. Phương trình (4.13) cho nghiệm

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

Giả sử năng lượng của hệ có giá trị gián đoạn, lúc đó ta viết lại (4.14) như sau:

$$\hat{H}\psi_n(\vec{r}) = E_n \psi(\vec{r}). \tag{4.15}$$

Như vậy, nghiệm của phương trình (4.11) được viết dưới dạng:

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}. \tag{4.16}$$

Hàm sóng (4.16) tương ứng với một trạng thái có giá trị năng lượng xác định được gọi là *trạng thái dừng*. Phương trình (4.15) được gọi là phương trình

Schrodinger cho trạng thái dừng (Phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian). Do tính chất tuyến tính của phương trình (4.3) nên nghiệm tổng quát của nó có dạng khác nhau tùy theo phổ trị riêng gián đoạn hay liên tục.

Khi $\hat{H}$ có phổ trị riêng gián đoạn thì:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_n c_n(t)\psi_n(\vec{r}). \quad (4.17)$$

Khi $\hat{H}$ có phổ trị riêng liên tục:

$$\Psi(\vec{r},t) = \int_E c_E \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} = \int_E c_E(t)\psi_E(\vec{r}) dE. \quad (4.18)$$

Các hệ số c_n và c_E trong (4.17) và (4.18) được xác định từ điều kiện ban đầu. Chẳng hạn từ (4.17), ta thấy khi t = 0 thì:

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},0) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}),$$

từ đó ta tính được:

$$c_n =< \psi_n(\vec{r})|\Psi(\vec{r},0) > . \quad (4.19)$$

Tương tự, hệ số c_E có thể tính theo công thức

$$c_E =< \psi_E(\vec{r})|\Psi(\vec{r},0) > . \quad (4.20)$$

Ta có thể chứng minh các tính chất sau của một hệ lượng tử ở trạng thái dừng:

(1). Sự phụ thuộc của các hàm sóng của các trạng thái dừng của hệ vào thời gian được xác định đơn trị bởi giá trị năng lượng ở trạng thái đó.

(2). Ở trạng thái dừng mật độ xác suất và mật độ dòng xác suất không phụ thuộc vào thời gian.

(3). Ở trạng thái dừng, trị trung bình của một đại lượng động lực có toán tử tương ứng không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì không đổi.

(4). Xác suất đo giá trị của một đại lượng động lực ở trạng thái dừng không phụ thuộc thời gian.

§ 5 CÁC TÍNH CHẤT CƠ BẢN CỦA NGHIỆM PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER DỪNG

Phương trình $\hat{H}\psi = E\psi$ cho nghiệm với mọi E, nhưng không phải giá trị nào của E cũng ứng với một trạng thái vật lý, mà chỉ có những trạng thái thỏa mãn các điều kiện tiêu chuẩn của hàm sóng mới ứng với một trạng thái vật lý. Các điều kiện đó là:

(1) Hàm ψ phải đơn trị.

(2) Hàm ψ phải liên tục. Trong trường hợp thế năng gián đoạn thì ψ và đạo hàm theo tọa độ $\psi\,'$ cũng liên tục tại những điểm gián đoạn đó. Tuy nhiên ở những miền mà thế năng $U \to \infty$ thì $\psi = 0$ và $\psi\,'$ gián đoạn.

(3) Nếu thế năng không tiến đến ∞ thì hàm sóng phải hữu hạn trong toàn bộ không gian. Điều kiện này cũng thỏa mãn trong trường hợp thế năng $U \to \infty$ tại một điểm nào đó nhưng không quá nhanh (thường thì U có dạng $U \approx 1/r^s$ với $s \leq 2$).

(4) Khi thế năng là hàm chẵn của toạ độ thì toán tử Hamilton cũng là hàm chẵn, lúc đó ta sẽ có hai trường hợp:

(a). Nếu phổ năng lượng là không suy biến thì trạng thái của hạt là liên kết và có thể chẵn hoặc lẽ.

(b). Nếu phổ năng lượng là suy biến thì trạng thái của hạt được biểu diễn dưới dạng các trạng thái chẵn và lẽ, nghĩa là chúng không có tính chẵn lẽ xác định.

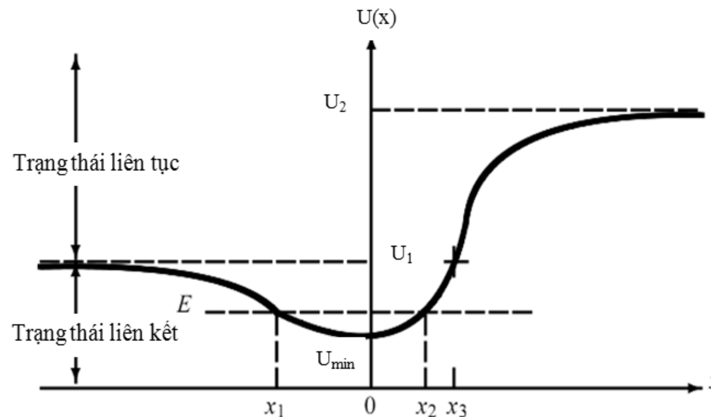
§ 6 PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER CHO HẠT CHUYỂN ĐỘNG MỘT CHIỀU

6.1 CÁC TÍNH CHẤT CỦA CHUYỂN ĐỘNG MỘT CHIỀU

Phương trình Schrodinger trong trường hợp chuyển động một chiều theo trục x có dạng

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}(E - U(x))\psi(x) = 0, \tag{4.21}$$

trong đó $U(x)$ là thế năng không phụ thuộc thời gian. Trạng thái và năng lượng của hạt tìm được bằng cách giải phương trình (4.21) có dạng phụ thuộc vào dạng của thế năng $U(x)$. Ta khảo sát trường hợp khi thế năng có dạng tổng quát như ở hình 4.1.



Hình 4.1: Dạng của thế năng U(x) trong trường hợp tổng quát.

1. Trạng thái liên kết: Khi hạt bị giam giữ trong một miền nào đó thì chuyển động của hạt giới hạn về cả hai phía, ví dụ trên hình 4.1 chuyển động của hạt có năng lượng $E < U_1$ bị giới hạn trong miền $x_1 \leq x \leq x_2$. Sử dụng điều kiện liên tục của hàm sóng (và đạo hàm theo tọa độ của nó) tại các điểm biên trong lúc giải phương trình Schrodinger, ta nhận được phổ trị riêng của năng lượng là gián đoạn.

2. Trạng thái không liên kết: Khi chuyển động của hạt không bị giới hạn, ta nói trạng thái của hạt không liên kết (chuyển động tự do). Trên sơ đồ thế năng ở hình 4.1 có 2 miền ứng với chuyển động tự do của hạt.

a) Trường hợp hạt có năng lượng ở trong khoảng $U_1 < E < U_2$: Chuyển động của hạt là vô hạn về phía $x = -\infty$. Điều đó có nghĩa là hạt có thể chuyển động giữa $x = x_3$ và $x \to -\infty$. Phổ năng lượng trong chuyển động này là liên tục và không suy biến ứng với hàm sóng mô tả chuyển động tự do theo chiều âm của trục x.

b) Trường hợp $E > U_2$: Hạt chuyển động ra xa vô hạn về cả hai phía ($x \to \pm\infty$). Phổ năng lượng của hạt là liên tục và suy biến bậc 2. Điều này ứng với nghiệm của phương trình (4.21) có hai nghiệm, một ứng với chuyển động tự do của hạt theo chiều dương, một theo chiều âm.

3. Trường hợp thế năng đối xứng: Trong trường hợp thế năng là một hàm chẵn đối với tọa độ thì Hamiltonian cũng là hàm chẵn, lúc đó hạt ở trạng thái liên kết và nghiệm của phương trình Schrodinger (4.21) được phân thành hai lớp: lớp nghiệm chẵn ($\psi(x) = \psi(-x)$) và lớp nghiệm lẻ ($\psi(x) = -\psi(-x)$).

6.2 CHUYỂN ĐỘNG CỦA HẠT TỰ DO

Ta xét một hạt chuyển động tự do một chiều theo trục x. Vì thế năng $U(x) = 0$ nên phương trình Schrodinger cho trạng thái dừng của hạt có dạng:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \tag{4.22}$$

Nếu đặt $k^2 = 2mE/\hbar^2$ thì nghiệm của phương trình (4.22) có dạng:

$$\psi_k(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \tag{4.23}$$

Số hạng thứ nhất trong (4.23) mô tả chuyển động theo chiều dương của trục x (sóng tới), số hạng thứ hai mô tả chuyển động theo chiều âm (sóng phản xạ). Biểu thức (4.23) có thể viết gọn lại như sau:

$$\psi_k(x) = Ae^{ikx}, \tag{4.24}$$

trong đó $k > 0$ ứng với chuyển động theo chiều dương, $k < 0$ ứng với chuyển động theo chiều âm.

Do hạt chuyển động tự do nên nghiệm (4.24) thỏa mãn các điều kiện liên tục và hữu hạn trong toàn bộ không gian với năng lượng E có giá trị bất kỳ. Biểu thức của năng lượng là

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{4.25}$$

Nếu để ý rằng $p = \hbar k$ thì biểu thức của năng lượng có thể viết dưới dạng:

$$E_p = \frac{p^2}{2m}. \tag{4.26}$$

Phổ trị riêng năng lượng là liên tục, có giá trị nhất định trong khoảng từ 0 đến ∞, trong đó $p = p_x = \hbar k$ là xung lượng của hạt tự do, $k = k_x$ là thành phần vectơ sóng trên trục x.

Hàm sóng phụ thuộc thời gian ứng với hạt tự do ở trạng thái dừng có dạng:

$$\psi_k(x,t) = Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}, \tag{4.27}$$

trong đó, ta đã thay giá trị của E theo (4.25).

Hàm sóng ứng với hạt tự do là nghiệm của phương trình Schrodinger tổng quát và có dạng:

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} c_k \psi_k(x,t) dk = A \int_{-\infty}^{+\infty} c_k e^{i(kx-\omega t)} dk, \tag{4.28}$$

với $A = 1/\sqrt{2\pi}$ do điều kiện trực chuẩn của hàm riêng thuộc phổ liên tục dạng (4.24) và $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Hàm sóng dạng (4.28) diễn tả dạng của bó sóng, đó là tổ hợp tuyến tính của sóng phẳng dạng (4.27) với các giá trị k khác nhau. Hệ số c_k chính là biên độ của bó sóng và được xác định từ điều kiện ban đầu:

$$\Psi(x,0) = A \int_{-\infty}^{\infty} c(k) e^{ikx} dk, \tag{4.29}$$

từ đó:

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx. \tag{4.30}$$

Ví dụ 6.2.1:

Một hạt tự do ban đầu định xứ trong miền $-a < x < a$, được cho chuyển động từ thời điểm $t = 0$:

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A, & \text{khi} \quad -a < x < a, \\ 0, & \text{khi} \quad x < -a,\ x > a \end{cases} \tag{4.31}$$

trong đó A và a là các hằng số thực dương. Tìm hàm sóng tại thời điểm t.

Lời giải:

+ Chuẩn hóa hàm $\Psi(x,0)$ ta được:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 dx = |A|^2 \int_{-a}^{a} dx = 2a|A|^2 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2a}}. \quad (4.32)$$

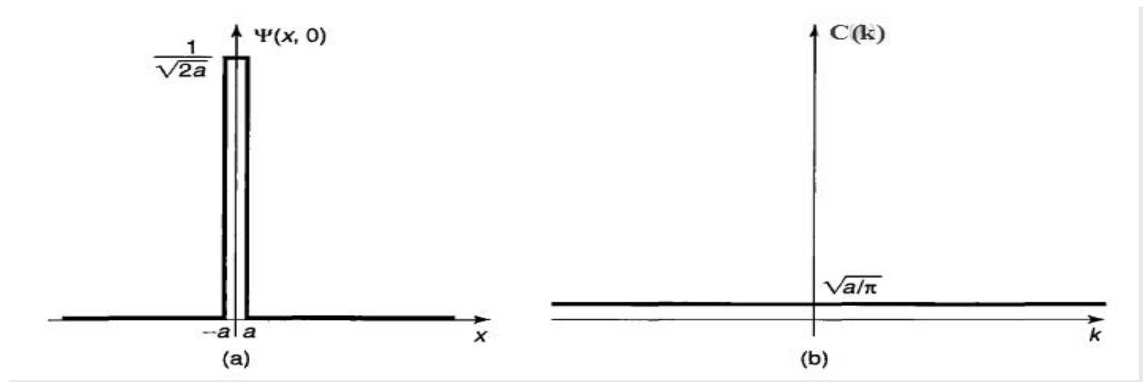
Sử dụng công thức (4.30), với cận tích phân là (-a, +a), ta được:

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^{a} e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \frac{e^{-ikx}}{(-ik)}\Bigg|_{-a}^{a} = \ldots = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin ka}{k}. \quad (4.33)$$

Như vậy, hàm sóng của hạt ở thời điểm t có dạng:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin ka}{k} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk. \quad (4.34)$$

Tích phân trong (4.34) không thể biểu diễn qua hàm sơ cấp mà chỉ có thể tính được bằng phương pháp số. Ta phân biệt hai trường hợp sau: + Khi a rất bé

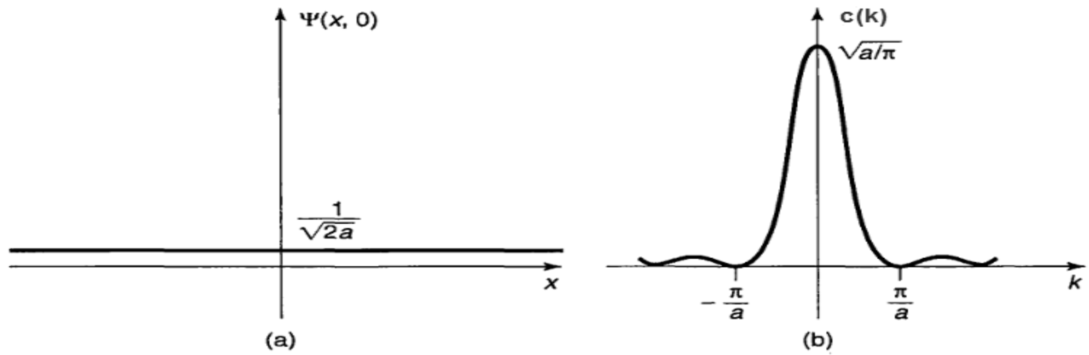


Hình 4.2: Đồ thị của hàm $\Psi(x,0)$ theo x và hàm $c(k)$ theo k.

thì $\sin(ka) \approx ka$, nên $c_k \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}}$. Hình 4.2 mô tả đồ thị của hàm $\Psi(x,0)$ theo x và hàm $c(k)$ theo k trong trường hợp a bé.

+ Khi a rất lớn thì $c(k)$ có thể viết lại như sau:

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin ka}{k} = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\sin ka}{ka}. \quad (4.35)$$



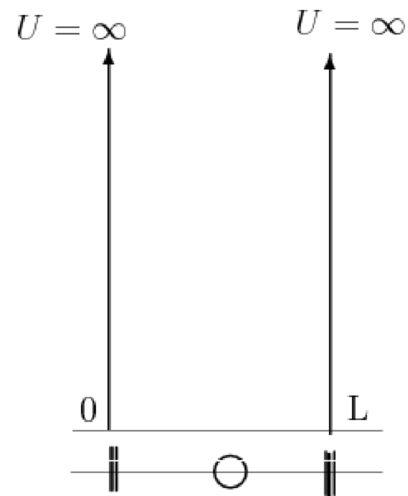
Hình 4.3: Đồ thị của hàm $\Psi(x,0)$ theo x và hàm $c(k)$ theo k.

Như vậy, $\sin ka/ka$ cực đại tại $ka = 0$ hay $k = 0$ và giảm về 0 tại $ka = \pm\pi$, hay $k = \pm\pi/a$. Hình 4.3 mô tả đồ thị của hàm $\Psi(x,0)$ theo x và hàm $c(k)$ theo k trong trường hợp a lớn.

Từ đồ thị ở hai hình vẽ trên ta có thể kiểm tra một cách hình ảnh sự đúng đắn của hệ thức bất định Heisenberg giữa tọa độ x và xung lượng k.

6.3 GIẾNG THẾ VUÔNG GÓC SÂU VÔ HẠN

Xét trường hợp một hạt chuyển động tự do trong trong giếng thế một chiều có bề rộng L. Lúc đó hạt hoàn toàn bị nhốt trong giếng. Về mặt hình thức hạt có thể coi tương đương với một viên bi trượt không ma sát dọc theo một sợi dây được căng giữa hai bức tường rắn sao cho va chạm của viên bi với chúng là tuyệt đối đàn hồi. Thế năng đang xét có dạng như ở Hình 4.4.



Hình 4.4: Sơ đồ thế năng của giếng thế một chiều vuông góc sâu vô hạn.

Dạng giải tích của thế năng là:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{khi } 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{khi } x < 0 \text{ và } x > L. \end{cases} \quad (4.36)$$

Ta thấy rằng ngoài giếng thế $U(x) = \infty$ hàm sóng $\psi(x) = 0$, hạt không tồn tại ở ngoài giếng thế. Như vậy ta chỉ xét hạt trong giếng thế $(0 \leq x \leq L)$.

Phương trình Schrodinger cho trạng thái dừng có dạng:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \quad (4.37)$$

Đặt $k^2 = 2mE/\hbar^2$, phương trình (4.37) trở thành

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0. \quad (4.38)$$

Giả sử ta chọn nghiệm của phương trình dưới dạng:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx. \quad (4.39)$$

Do điều kiện liên tục của hàm sóng tại các điểm biên (điểm có thế năng gián đoạn) nên ta có: $\psi(x) = 0$ và $\psi(L) = 0$. Ta suy ra: $B = 0$ và $\sin kL = 0$. Vì vậy: $kL = n\pi$. Vì $k^2 = 2mE/\hbar^2$ nên ta có biểu thức năng lượng của hạt trong hố thế:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2 = n^2E_0, \quad (4.40)$$

trong đó: $E_0 = \pi^2\hbar^2/2mL^2$ là năng lượng của hạt ứng với n = 1 và được gọi là năng lượng của hạt ở trạng thái cơ bản.

Như vậy, hạt ở trong giếng có thể được tìm thấy với một trong các giá trị năng lượng $E_0, 4E_0, , 9E_0, 16E_0$,.... Vì năng lượng của hạt chỉ là động năng nên vận tốc của hạt chỉ có những giá trị nhất định. Đây là điều khác hẳn với trường hợp cổ điển: khi viên bi trượt không ma sát trên thanh với một vận tốc đầu nào đó thì vận tốc của nó luôn luôn không đổi và bằng chính vận tốc ban đầu.

Hàm riêng (4.39) bây giờ có thể viết lại như sau:

$$\psi_n(x) = A\sin kx = A\sin\frac{n\pi}{L}x. \quad (4.41)$$

Hệ số A được xác định từ điều kiện chuẩn hóa $\langle\psi_n(x)|\psi_n(x)\rangle = 1$, hay

$$A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = 1,$$

tính tích phân này, ta được $A = \sqrt{2/L}$.
Vậy hàm sóng ở trạng thái dừng ứng với hạt có năng lượng E_n là

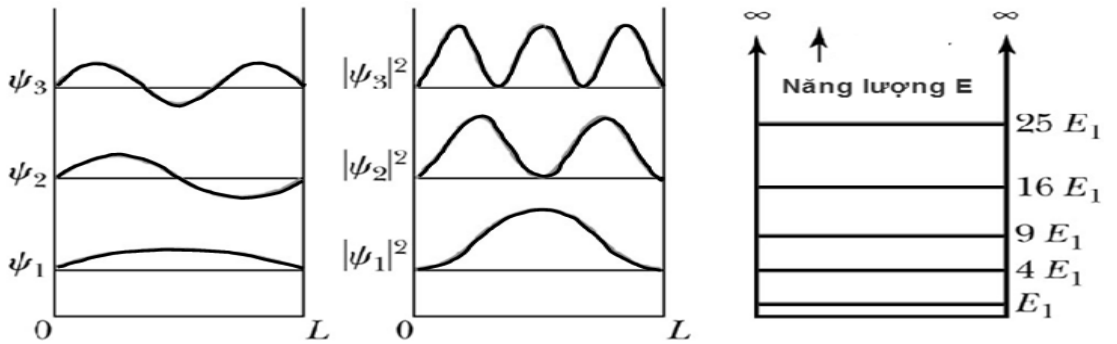
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x, \qquad n = 1, 2, 3... \tag{4.42}$$

Ta có thể đưa ra một số kết luận về bài toán giếng thế một chiều vuông góc sâu vô hạn như sau:

(a) Năng lượng E_n của hạt trong giếng bị lượng tử hóa. Điều này xảy ra là do chuyển động của hạt mặc dầu tự do nhưng bị giới hạn.

(b) Hàm sóng ψ_n là hàm chẵn (khi n lẽ) và hàm lẽ (khi n chẵn) đối với tâm của giếng.

(c) Hàm sóng ψ_n có $n-1$ nút (node).



Hình 4.5: Đồ thị hàm sóng $\psi_n(x)$, mật độ xác suất$|\psi_n(x)|^2$ và năng lượng E_n trong giếng thế vuông 1 chiều sâu vô hạn

Hình 4.5 chỉ đồ thị các hàm sóng ψ, mật độ xác suất tìm hạt và các mức năng lượng tương ứng với các trạng thái khác nhau.

6.4 GHI CHÚ VỀ TRƯỜNG HỢP GIẾNG THẾ ĐỐI XỨNG

Trong trường hợp này, thế năng có dạng:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } -L/2 < x < +L/2 \\ \infty & \text{khi } |x| \geqslant L/2 \end{cases} \tag{4.43}$$

Sơ đồ thế năng có dạng như hình 4.6.

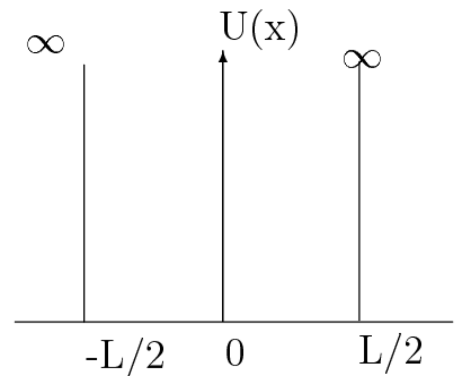
Vì thế năng là hàm chẵn của tọa độ nên nghiệm của phương trình (4.38) được phân thành hai lớp nghiệm lẻ và nghiệm chẵn:

+ Đối với lớp nghiệm chẵn:

$\psi(x) = \psi(-x)$, thay vào hàm sóng (4.39), ta được:

$$\psi_n(x) = B\cos kx. \tag{4.44}$$

Áp dụng điều kiện biên $\psi(L/2) = 0$, ta được $\cos kL/2 = 0$, suy ra $k = n\pi/L$ trong đó n = 1,3,5...



Hình 4.6: Sơ đồ thế năng của giếng đối xứng 1 chiều.

+ Tương tự, đối với lớp nghiệm lẻ:

$\psi(x) = -\psi(-x)$, thay vào hàm sóng (4.39), ta được:

$$\psi_n(x) = A\sin kx, \quad \text{với } k = n\pi/L \quad n = 2, 4, 6... \tag{4.45}$$

Dùng điều kiện chuẩn hoá ta tính được các hệ số A và B có giá trị là $\sqrt{2/L}$. Như vậy, trong cả hai lớp nghiệm ta đều có: $k = n\pi/L$ và do đó năng lượng của hạt được tính theo hệ thức:

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2. \tag{4.46}$$

Ví dụ 6.3.1:

Một hạt khối lượng m bị nhốt trong 1 giếng thế vuông một chiều sâu vô hạn bề rộng a. Tại $t = 0$ hàm sóng chuẩn hóa của hạt là:

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\sin\frac{\pi x}{a}. \tag{4.47}$$

a) Tìm hàm sóng tại thời điểm $t = t_0$.

b) Tìm năng lượng trung bình tại $t = 0$ và $t = t_0$.

c) Tìm xác suất tìm hạt ở phần bên trái của giếng (nghĩa là ở trong miền $0 \leq x \leq a/2$ tại $t = t_0$.

Lời giải:

a) Hàm sóng tại thời điểm t được khai triển theo hàm của trạng thái dừng:

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t},$$

trong đó $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$.

Từ đó, hàm sóng tại thời điểm $t = 0$ có dạng:

$$\Psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x).$$

Mặt khác, hàm $\Psi(x,0)$ ở (4.47) có thể viết lại như sau:

$$\begin{aligned}
\Psi(x,0) &= \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right] \sin \frac{\pi x}{a} \\
&= \sqrt{\frac{8}{5a}} \sin \frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{2}{5a}} \sin \frac{2\pi x}{a} \\
&= \sqrt{\frac{4}{5}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{1}{5}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi x}{a} = c_1 \psi_1(x) + c_2 \psi_2(x).
\end{aligned}$$

Như vậy, hàm sóng tại thời điểm $t = t_0$ là:

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t_0) &= \sum_{n=1,2} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \sum_{n=1,2} c_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2} t} \\
&= c_1 \psi_1(x) e^{-\frac{i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}} + c_2 \psi_2(x) e^{-\frac{i\pi^2\hbar t_0 4}{2ma^2}} \\
&= \sqrt{\frac{8}{5\text{a}}} \sin \frac{\pi x}{a} e^{-\frac{i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}} + \sqrt{\frac{2}{5\text{a}}} \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-\frac{i2\pi^2\hbar t_0}{ma^2}} \\
&= \sqrt{\frac{8}{5\text{a}}} \left[e^{-\frac{i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}} + e^{-\frac{i2\pi^2\hbar t_0}{ma^2}} \cos \frac{\pi x}{a}\right] \sin \frac{\pi x}{a}.
\end{aligned}$$

b) Năng lượng trung bình của hạt không phụ thuộc thời gian và có dạng:

$$\overline{E} = \sum_n w_n E_n = \sum_n |c_n(t)|^2 E_n = \sum_n |c_n(0)|^2 E_n = \frac{4}{5} E_1 + \frac{1}{5} E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{5ma^2}.$$

c) Xác suất tìm hạt trong miền $0 \le x \le a/2$ tại $t = t_0$ là:

$$P = \int_0^{a/2} |\Psi(x,t_0)|^2 dx = \sqrt{\frac{8}{5a}} \sin\frac{\pi x}{a} e^{-\frac{i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}} + \sqrt{\frac{2}{5a}} \sin\frac{2\pi x}{a} e^{-\frac{i2\pi^2\hbar t_0}{ma^2}}$$
$$= \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[e^{-\frac{i\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}} + e^{-\frac{i2\pi^2\hbar t_0}{ma^2}} \cos\frac{\pi x}{a} \right] \sin\frac{\pi x}{a}.$$
$$= \frac{8}{5a} \int\limits_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \left[1 + \cos^2\frac{\pi x}{a} + 2\cos\frac{\pi x}{a} \cos\left(\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right) \right] dx$$
$$= \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos\left(\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right).$$

Ví dụ 6.3.2:

Một electron chuyển động tự do trong một giếng thế một chiều sâu vô hạn có thành ở tại x=0 và x=a. Electron ban đầu ở trạng thái cơ bản, nếu ta đột ngột tăng bề rộng của giếng lên 4 lần, hãy tính xác suất tìm electron ở trạng thái cơ bản trong giếng mới.

Lời giải:

Năng lượng và hàm sóng ở trạng thái cơ bản (n=1) của electron ở giếng có bề rộng a là:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a})\right).$$

Khi bề rộng của giếng lên 4 lần thì x biến thiên trong khoảng $x = 0$ đến $x = 4a$. Năng lượng và hàm sóng ở trạng thái cơ bản (n=1) của electron ở giếng có bề rộng 4a là:

$$E_1' = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m(4a)^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{32ma^2}, \quad \phi_1(x) = \sqrt{\frac{1}{2a}} \sin\left(\frac{\pi x}{4a})\right).$$

Xác suất tìm electron ở trạng thái cơ bản ϕ_1 của giếng mới chính là xác suấtđể electron có năng lượng E_1' với trạng thái ban đầu là ψ_1. Theo công thức tính xác suất, ta có:

$$w_1(E\,'_1) = |\langle\phi_1|\psi_1\rangle|^2 = \left| \int_0^a \phi_1^* \psi_1 dx \right|^2 = \frac{1}{a^2} \left| \int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{4a})\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a})\right) dx \right|^2.$$

Sử dụng biến đổi lượng giác $\sin a \sin b = \frac{1}{2}\cos(a-b) - \frac{1}{2}\cos(a+b)$ ta tính được:

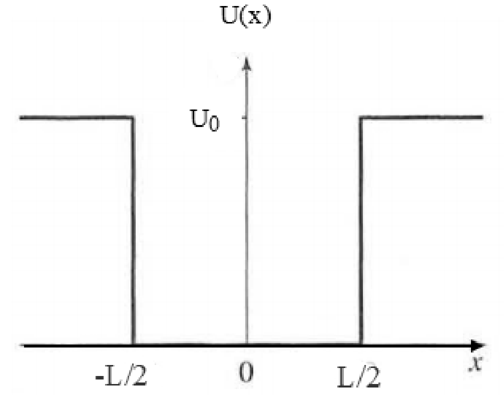
$$w_1(E\,'_1) = \frac{1}{a^2}\left|\frac{1}{2}\int_0^a \cos\left(\frac{3\pi x}{4a})\right)dx - \frac{1}{2}\int_0^a \cos\left(\frac{5\pi x}{4a})\right)dx\right|^2.$$

Tính ra, ta được: $w_1(E_1) = 128/15^2\pi^2 = 0.058 = 5,8\%$.

6.5 GIẾNG THẾ HÌNH CHỮ NHẬT CÓ CHIỀU SÂU HỮU HẠN

Bây giờ ta xét trường hợp giếng thế hình chữ nhật có chiều cao hữu hạn với thế năng có dạng sau:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{khi } -L/2 < x < L/2, \\ U_0, & \text{khi } |x| > L/2. \end{cases} \quad (4.48)$$



Hình 4.7: Sơ đồ thế năng của giếng thế một chiều vuông góc sâu hữu hạn.

Sơ đồ thế năng được cho ở hình 4.7. Có thể thấy rằng khi năng lượng $E > U_0$ thì hạt tự do không bị liên kết, năng lượng E là liên tục. Ngược lại, khi $E < U_0$ hạt bị nhốt trong giếng, năng lượng của hạt bị lượng tử hóa ứng với các trạng thái liên kết. Ta sẽ giải phương trình Schrodinger cho từng miền thế năng để tìm năng lượng và hàm sóng ứng với các trạng thái khác nhau của hạt. Đặt

$$\begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \\ k' &= \frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{-2m(U_0-E)}}{\hbar} = i\kappa, \end{aligned} \quad (4.49)$$

trong đó $\kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar} > 0$.

Sử dụng ký hiệu $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \equiv \psi"$ ta được phương trình Schrodinger và nghiệm

tương ứng cho từng miền như sau:

$$\text{Miền I } (U(x) = U_0) : \psi_1^{"}(x) - \kappa^2\psi_1(x) = 0 \to \psi_1(x) = Ae^{\kappa x},$$
$$\text{Miền II } (U(x) = 0) : \psi_2^{"}(x) - k^2\psi_2(x) = 0 \to \psi_2(x) = B\cos kx + C\sin kx,$$
$$\text{Miền III } (U(x) = U_0) : \psi_3^{"}(x) - \kappa^2\psi_3(x) = 0 \to \psi_3(x) = De^{-\kappa x}.$$

Vì giếng thế là đối xứng nên nghiệm ở miền II thuộc về hai lớp nghiệm chẵn ($\psi_2 = \psi_c = B\cos kx$) hoặc nghiệm lẻ ($\psi_2 = \psi_\ell = C\cos kx$). Sử dụng điều kiện liên tục của hàm sóng và đạo hàm của nó tại các điểm biên ($x = \pm L/2$), ta được:

$$\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{\kappa}{k} \text{ đối với lớp nghiệm chẵn,} \tag{4.50}$$
$$\cot\left(\frac{kL}{2}\right) = -\frac{\kappa}{k} \text{ đối với lớp nghiệm lẻ.} \tag{4.51}$$

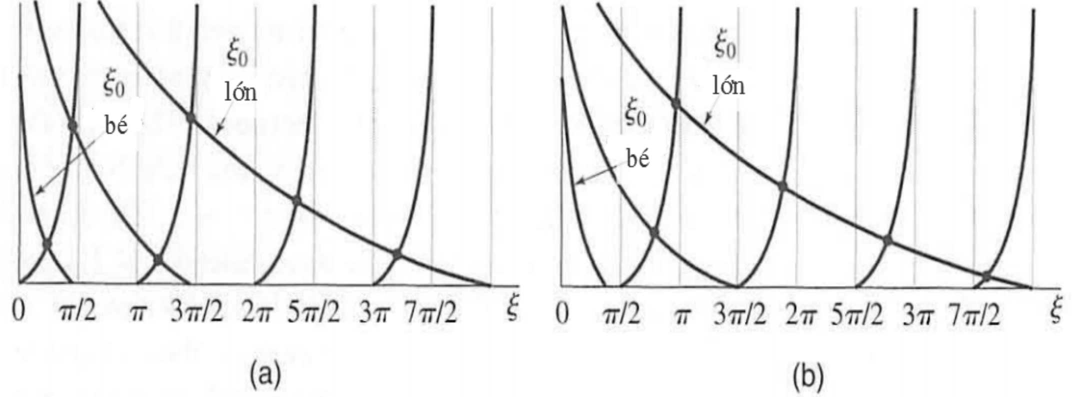
Thay k và κ vào hai phương trình trên và đặt $\xi^2 = mL^2E_n/(2\hbar^2)$, $\xi_0^2 = mL^2U_0/(2\hbar^2)$, ta được:

$$\xi\tan\xi = \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2} \text{ đối với lớp nghiệm chẵn,} \tag{4.52}$$
$$-\xi\cot\xi = \sqrt{\xi_0^2 - \xi^2} \text{ đối với lớp nghiệm lẻ.} \tag{4.53}$$

Hai phương trình siêu việt trên đây xác định các giá trị năng lượng cho phép của hạt trong giếng thế hữu hạn. Giá trị năng lượng chứa trong số hạng $\xi = ka/2 = \sqrt{mE/2\hbar^2}L$. Các phương trình này không thể giải bằng phương pháp giải tích mà chỉ có giải bằng phương pháp tính số hoặc đồ thị. Ở đây ta sẽ giải bằng phương pháp đồ thị.

Hình 4.8 a. biểu diễn đồ thị của $\tan\xi$ và $\sqrt{\xi_0^2 - \xi^2}/\xi$ theo ξ. Hình 4.8 b. biểu diễn đồ thị của $-\cot\xi$ và $\sqrt{\xi_0^2 - \xi^2}/\xi$ theo ξ với các giá trị ξ_0 khác nhau, nghĩa là U_0 và L khác nhau. Giao điểm của các đường cong này xác định các giá trị cho phép ứng với các giá trị nhất định của ξ_0. Đối với trường hợp trạng thái chẵn, khi ξ_0 bé chỉ có giao điểm, nghĩa là một giá trị năng lượng cho phép. Khi ξ_0 tăng số giá trị năng lượng cho phép tăng lên. Trong trường hợp trạng thái

lẽ vì $-\cot\xi < 0$ nên khi $\xi_0 < \pi/2$ sẽ không có giao điểm nào xuất hiện, nghĩa là không có giá trị năng lượng cho phép.



Hình 4.8: Nghiệm đồ thị cho giếng thế sâu hữu hạn. Các giá trị năng lượng được cho bởi giao điểm của $\sqrt{\xi_0^2-\xi^2}/\xi$, với $\tan\xi$ và $-\cot\xi$, trong đó $\xi^2 = mL^2E/(2\hbar^2)$ và $\xi_0^2 = mL^2V_0/(2\hbar^2)$.

Một cách tổng quát giá trị của bề rộng giếng mà tại đó có n trạng thái liên kết, nghĩa là có n giá trị năng lượng được cho bởi:

$$\xi_0 = \frac{n\pi}{2} \text{ hoặc } U_0 = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{2\hbar^2}{mL^2}n^2. \tag{4.54}$$

Như vậy, phổ năng lượng bao gồm các trạng thái chẵn và lẻ xen kẻ nhau, trong đó trạng thái cơ bản là trạng thái chẵn.

Trường hợp giới hạn khi $U_0 \to \infty$ thì $\xi_0 \to \infty$ thì hàm $\sqrt{\xi_0^2-\xi^2}/\xi$ sẽ cắt $\tan\xi$ và $-\cot\xi$ tại các điểm tiệm cận $\xi = n\pi/2$, vì khi $U_0 \to \infty$ cả $\tan\xi$ và $\cot\xi$ tiến tới vô cùng:

$$\begin{aligned}\tan\xi \to \infty \to \xi &= \frac{2n+1}{2}\pi \qquad \text{n=0,1,2,3,...,}\\ \cot\xi \to \infty \to \xi &= n\pi \qquad \text{n=1,2,3,....}\end{aligned}$$

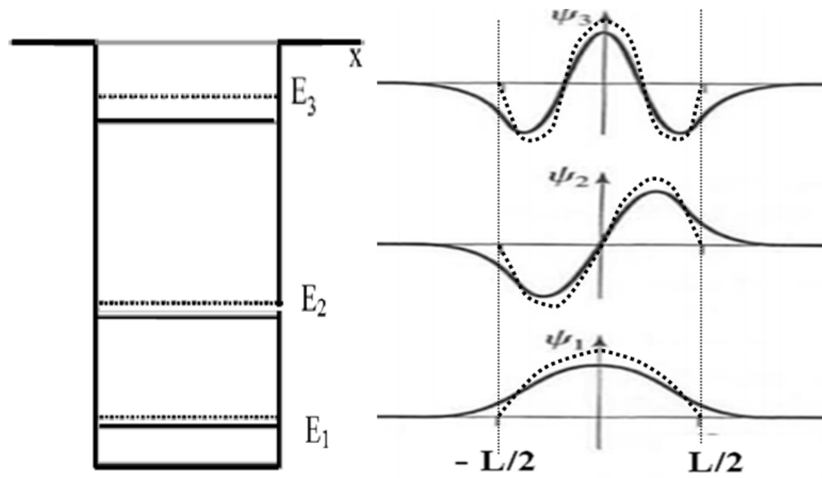
Kết hợp cả hai điều kiện này ta được

$$\xi = \frac{n\pi}{2} \quad \text{n=1,2,3,....} \tag{4.55}$$

Vì $\xi^2 = mL^2E_n/(2\hbar^2)$ nên ta nhận được biểu thức của năng lượng cho trường hợp thế vô hạn

$$\xi = \frac{n\pi}{2} \rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2. \tag{4.56}$$

Hình 4.9 biểu diễn 3 mức năng lượng đầu tiên và các hàm sóng tương ứng.



Hình 4.9: Sơ đồ 3 mức năng lượng và hàm sóng trong giếng thế một chiều. Đường liền nét ứng với thế hữu hạn, đường đứt nét ứng với thế vô hạn.

Trạng thái cơ bản (n=1) và trạng thái kích thích thứ hai (n=3) là trạng thái chẵn, trạng thái kích thích thứ nhất (n=2) là trạng thái lẻ. Đồ thị cho thấy rằng, các hàm sóng "lan tỏa" qua miền $E < U_0$. Điều này có nghĩa là xác suất tìm hạt ($|\psi(x)|^2$ ở miền I và miền II khác không, nghĩa là hạt có thể có mặt ở bên ngoài giếng. Mức độ "thấm qua" của hạt phụ thuộc vào độ lớn của κ, nghĩa là của độ sâu U_0 của giếng, hạt thấm qua được một đoạn $1/\kappa = \hbar/\sqrt{2m(U_0 - E)}$ kể từ biên của giếng. Chú ý rằng khi $U_0 \rightarrow \infty$ thì $1/\kappa \rightarrow 0$, nghĩa là hạt không thể ra khỏi giếng. Đây là trường hợp giếng thế vô hạn như đã khảo sát ở trên.

Ví dụ 6.5.1:

Hạt chuyển động trong trường thế một chiều có dạng:

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{khi} \quad x < 0, \\ 0, & \text{khi} \quad 0 \leq x \leq a, \\ U_0, & \text{khi} \quad x > a. \end{cases}$$

a) Chứng tỏ rằng các trạng thái năng lượng liên kết khi $E < U_0$ được cho bởi phương trình

$$\tan \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = -\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}.$$

b) Vẽ đồ thị của hàm sóng ứng với trạng thái cơ bản.

Lời giải:

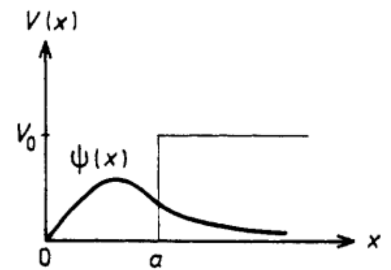
Phương trình Schrodinger cho miền có thế năng $U = 0$ và miền có thế năng $U = U_0$ là:

$$\begin{aligned} \psi_1^{"} + k_0^2 \psi_1 &= 0 \quad \text{khi} \quad 0 \leq x \leq a, \\ \psi_2^{"} - \kappa^2 \psi_2 &= 0 \quad \text{khi} \quad x > a, \end{aligned}$$

trong đó: $k_0 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$.

Nghiệm của 2 phương trình trên có dạng:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A \sin k_0 x \quad \text{khi} \quad 0 \leq x \leq a, \\ \psi_2 &= B e^{-\kappa x} \quad \text{khi} \quad x > a, \end{aligned}$$



Hình 4.10: Sơ đồ thế năng biểu diễn thế bậc thang

sử dụng điều kiện biên:

$$\begin{aligned} \psi_1(a) &= \psi_2(a) \Rightarrow A \sin k_0 a = B e^{-\kappa a} \\ \psi_1'(a) &= \psi_2'(a) \Rightarrow k_0 A \cos k_0 a = -\kappa B e^{-\kappa a}, \end{aligned}$$

chia 2 hai phương trình này vế theo vế, ta được:

$$\tan k_0 a / k_0 = -1/\kappa, \quad \text{hay} \quad \tan k_0 a = -k_0/\kappa.$$

Từ đó:

$$\tan \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = -\sqrt{\frac{E}{U_0 - E}}.$$

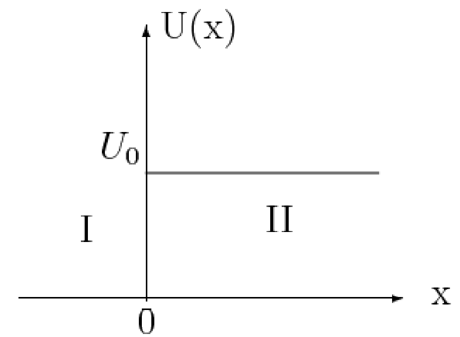
b) Đồ thị của hàm sóng $\psi_1 = A \sin k_0 x$ và $\psi_2 = Be^{-\kappa x}$ được cho ở Hình 4.10

6.6 CHUYỂN ĐỘNG QUA THẾ BẬC THANG

Bây giờ ta xét chuyển động của hạt trong trường thế có dạng (hình 4.11):

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } x < 0, \\ U_0 & \text{khi } x > 0. \end{cases}$$

Theo cơ học cổ điển hạt có năng lượng E đi từ miền I qua miền II sẽ có động năng $T = E - U_0$. Trong trường hợp khi $E > U_0$ thì $T \rangle 0$ nên hạt có thể đi qua được miền II mà không bị cản trở. Trong lúc đó khi $E < U_0$ thì ở miền II động năng của hạt sẽ có giá trị âm. Đây là điều không thể chấp nhận trong phạm vi cổ điển, miền II được gọi là *miền cấm cổ điển* và hạt không thể đi vào miền này.



Hình 4.11: Sơ đồ thế năng biểu diễn thế bậc thang

Bây giờ ta sẽ khảo sát chuyển động của hạt theo quan điểm của cơ học lượng tử và sẽ tìm ra một số tính chất đặc thù của hạt vi mô. Ta viết phương trình Schrodinger cho từng miền.

$$\text{Miền I:} \qquad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0, \tag{4.57}$$

$$\text{Miền II:} \qquad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_2 = 0. \tag{4.58}$$

Nếu đặt:

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{và} \quad k^2 = \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2} \tag{4.59}$$

thì hai phương trình trên được viết lại như sau:

$$\text{Miền I:} \qquad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_0^2\psi_1 = 0, \tag{4.60}$$

$$\text{Miền I:} \qquad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k^2\psi_2 = 0. \tag{4.61}$$

Nghiệm của 2 phương trình này là [1].

$$\psi_1 = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} = \psi_{1i} + \psi_{1r}, \tag{4.62}$$

$$\psi_2 = Ce^{ikx} + De^{-ikx} = \psi_{2t} + \psi_{2r}. \tag{4.63}$$

Chú ý rằng ở miền II không có sóng phản xạ nên hệ số D = 0. Lúc đó hàm sóng ψ_1 và ψ_2 trở thành:

$$\psi_1 = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}, \tag{4.64}$$

$$\psi_2 = Ce^{ikx}. \tag{4.65}$$

Ta định nghĩa hệ số phản xạ R và hệ số truyền qua T như sau:

$$R = \left|\frac{j_{1r}}{j_{1i}}\right|_x, \tag{4.66}$$

$$T = \left|\frac{j_{2t}}{j_{1i}}\right|_x. \tag{4.67}$$

Với j_x là thành phần trên trục x của vectơ mật độ dòng xác suất. Từ biểu thức của $\vec{j}$ theo (4.7) ta tính được:

$$(j_1)_i = (\hbar k_0/m)|A|^2,$$

$$(j_1)_r = (\hbar k_0/m)|B|^2,$$

$$(j_2)_t = (\hbar k/m)|C|^2.$$

Tuỳ theo giá trị của năng lượng E đối với thế năng U_0 mà ta xét hai trường hợp:

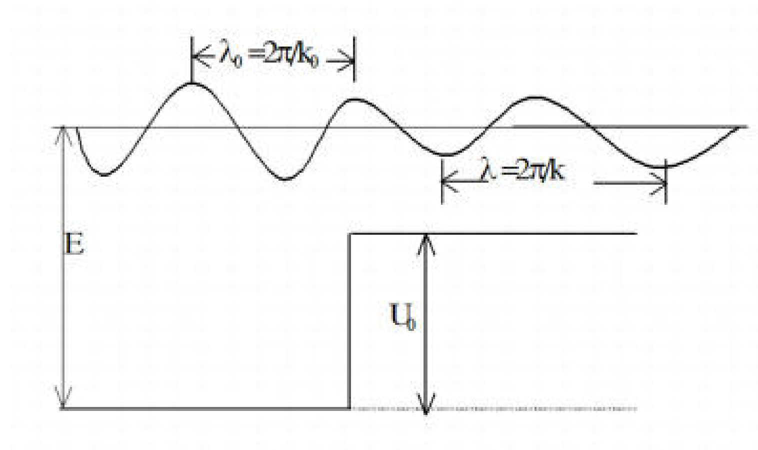
[1] Ta dùng các ký tự: i (incident = tới), r: reflect = phản xạ, t: transmit = truyền qua

a) Trường hợp $E > U_0$:

Khi đó các hệ số k_0 và k có giá trị thực, dương. Dùng điều kiện biên tại $x = 0$: $\psi_1(0) = \psi_2(0)$; $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$, ta tính được các hệ số B và C:

$$B = \frac{k_0 - k}{k_0 + k}A, \qquad C = \frac{2k_0}{k_0 + k}A. \tag{4.68}$$

Ta thấy hàm $\psi_{1r} = Be^{-ik_0x}$ và $\psi_{2t} = Ce^{-ikx}$ đều khác không. Điều đó chứng tỏ khi hạt tới gặp hàng rào thế năng thì một phần bị phản xạ ở miền I và một phần truyền qua miền II. Từ đó biểu thức của R và T trở thành:



Hình 4.12: Hàm sóng của hạt có năng lượng $E > U_0$.

$$\begin{aligned} R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{k_0 - k}{k_0 + k}\right|^2 = \left(\frac{k_0 - k}{k_0 + k}\right)^2, \\ T &= \frac{k}{k_0}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{k}{k_0}\left|\frac{2k_0}{(k_0 + k)^2}\right|^2 = \frac{4k_0k}{(k_0 + k)^2}. \end{aligned} \tag{4.69}$$

Dễ dàng nghiệm lại rằng $R + T = 1$. Điều này chứng tỏ số hạt được bảo toàn. Sự truyền qua của sóng từ miền I sang miền II khi $E > U_0$ được mô tả ở Hình 4.12.

b) Trường hợp $E < U_0$:

Khi đó hệ số $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - U_0)}$ là một số phức. Để sử dụng các kết quả của trường hợp $E > U_0$, tương tự như phần 6.5, ta đặt $k = i\kappa$, với

$\kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$. Hệ số phản xạ lúc này trở thành:

$$R = \left|\frac{k_0 - i\kappa}{k_0 + i\kappa}\right|^2 = 1. \tag{4.70}$$

Trường hợp này ta có sự phản xạ toàn phần. Sóng phản xạ có dạng:

$$\psi_{1r} = Be^{-ik_0x} = \frac{k_0 - i\kappa}{k_0 + i\kappa}e^{-ik_0x} = e^{-i(k_0x+\delta)}. \tag{4.71}$$

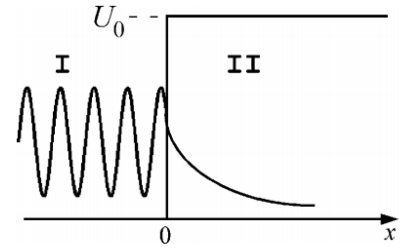
Như vậy, sự phản xạ làm dịch chuyển pha của sóng tới. Sóng truyền qua miền II khác không và có dạng:

$$\psi_{2t} = Ce^{ikx} = Ce^{-\kappa x} = \frac{2k_0}{k_0 + i\kappa}e^{-\kappa x}. \tag{4.72}$$

Mật độ xác suất tìm hạt trong miền II là:

$$\rho_2(x) = |\psi_{2t}|^2 = \frac{4k_0^2}{(k_0^2 + \kappa^2)}e^{-2\kappa x}. \tag{4.73}$$

Như vậy ta thấy ngay cả khi hạt có năng lượng $E < U_0$ vẫn có một xác suất nhất định để tìm thấy hạt ở trong miền II. Đây là một hiệu ứng đặc thù của cơ học lượng tử được gọi là "hiệu ứng đường ngầm (tunnel effect)". Xác suất tìm hạt tỉ lệ nghịch với x và giảm nhanh theo hàm mũ khi x tăng (Hình 4.13).



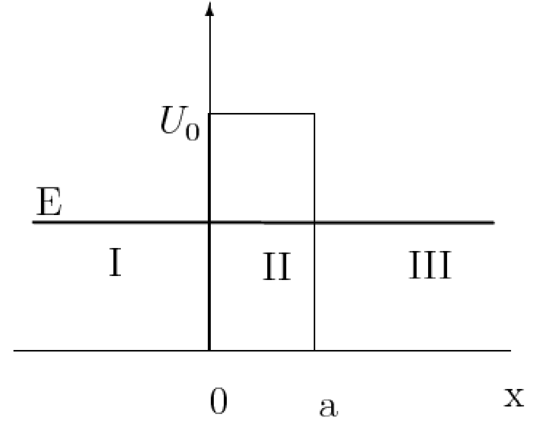
Hình 4.13: Hàm sóng của hạt có năng lượng $E < U_0$.

6.7 CHUYỂN ĐỘNG QUA HÀNG RÀO THẾ

Bây giờ ta xét chuyển động của hạt từ trái qua phải và gặp hàng rào thế có dạng đơn giản như ở Hình 4.14. Biểu thức giải tích của thế năng là:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } x < 0, \\ U_0 & \text{khi } 0 \leqslant x \leqslant a, \\ 0 & \text{khi } x > a. \end{cases}$$

Theo cơ học cổ điển nếu hạt có năng lượng nhỏ hơn độ cao U_0 của rào thế thì hạt bị chặn lại ở miền II nên không thể qua miền III được. Trong lúc đó theo phần 6.6 đã xét ở trên thì ngay cả khi năng lượng của hạt nhỏ hơn độ cao hàng rào thế U_0, hạt vẫn có khả năng xuyên qua miền II để có mặt ở miền III bằng hiệu ứng đường ngầm. Ta sẽ tìm hệ số truyền qua bằng cách giải phương trình Schrodinger cho từng miền khác nhau của thế năng.



Hình 4.14: Sơ đồ thế năng của hàng rào thế một chiều hình chữ nhật

$$\psi_1''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0, \tag{4.74}$$

$$\psi_2''(x) + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\psi_2(x) = 0, \tag{4.75}$$

$$\psi_3''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_3(x) = 0. \tag{4.76}$$

Đặt:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}},$$

lúc đó 3 phương trình trên được viết lại như sau:

$$\psi_1(x) = e^{ik_0x} + Ae^{-ik_0x} = \psi_{1i} + \psi_{1r}, \tag{4.77}$$

$$\psi_2(x) = Be^{\kappa x} + B'e^{-\kappa x} = \psi_{2i} + \psi_{2r}, \tag{4.78}$$

$$\psi_3(x) = Ce^{ik_0x} = \psi_{3i}. \tag{4.79}$$

Trong (4.77) ta đã chọn biên độ của sóng tới ở miền I bằng đơn vị và trong (4.79) không có sóng phản xạ ở miền III. Ta định nghĩa hệ số truyền qua như sau:

$$T = \left|\frac{j_{3i}}{j_{1i}}\right|_x = |C|^2. \tag{4.80}$$

Hệ số C được xác định từ điều kiện biên:

$$\begin{aligned}
\psi_1(0) &= \psi_2(0) => 1 + A = B + B', \\
\psi_2(a) &= \psi_3(a) => Be^{\kappa a} + B'e^{-\kappa a} = Ce^{ik_0 a}, \\
\psi_1'(0) &= \psi_2'(0) => ik_0(1 - A) = \kappa(B - B'), \\
\psi_2'(a) &= \psi_3'(a) => ik_0 Ce^{k_0 a} = \kappa(Be^{\kappa a} - B'e^{-\kappa a}).
\end{aligned}$$

Ta được một hệ 4 phương trình tuyến tính bậc nhất:

$$\begin{aligned}
A - B - B' + 1 &= 0, & (1) \\
-ik_0 A - \kappa B + \kappa B' + ik_0 &= 0, & (2) \\
e^{\kappa a}B + e^{-\kappa a}B' - e^{ik_0 a}C &= 0, & (3) \\
\kappa e^{\kappa a}B - \kappa e^{-\kappa a}B' - ik_0 e^{ik_0 a}C &= 0. & (4)
\end{aligned}$$

Giải hệ phương trình này ta tìm được hệ số C. Có nhiều cách giải hệ phương trình này, ở đây chỉ đưa ra một cách giải mà chúng tôi cho là đơn giản nhất, đó là cách giải bằng phương pháp khử thông thường.

Trước hết ta phải tìm các hệ số B và B' rồi thay vào phương trình (3) để tìm C:

+ Khử hệ số A: Nhân phương trình (1) cho ik_0 rồi cộng với phương trình (2), ta được:

$$-(\kappa + ik_0)B + (\kappa - ik_0)B' + 2ik_0 = 0. \qquad (5)$$

+ Khử hệ số C: Nhân (3) cho ik_0 rồi trừ với (4):

$$\begin{aligned}
ik_0 e^{\kappa a}B + ik_0.e^{-\kappa a}B' - ik_0 e^{ik_0 a}C - (\kappa e^{\kappa a}B - \kappa e^{-\kappa a}B' - ik_0 e^{ik_0 a}C) &= 0 \\
-(\kappa - ik_0)e^{\kappa a}B + (\kappa + ik_0)e^{-\kappa a}B' &= 0. \quad (6)
\end{aligned}$$

+ Nhân (5) cho $(\kappa + ik_0)e^{-\kappa a}$ và (6) cho $(\kappa - ik_0)$:

$$-(\kappa + ik_0)^2 e^{-\kappa a}B + (\kappa - ik_0)(\kappa + ik_0)e^{-\kappa a}B' + 2ik_0(\kappa + ik_0)e^{-\kappa a} = 0 \qquad (7)$$

$$-(\kappa - ik_0)^2 e^{\kappa a}B + (\kappa + ik_0)(\kappa - ik_0)e^{-\kappa a}B' = 0. \qquad (8)$$

Lấy (8) - (7), ta tìm được hệ số B:

$$B = \frac{2ik_0(\kappa + ik_0)e^{-\kappa a}}{(\kappa + ik_0)^2 e^{-\kappa a} - (\kappa - ik_0)^2 e^{\kappa a}}. \tag{4.81}$$

Để tìm B', ta lại nhân (5) cho $(\kappa - ik_0)e^{\kappa a}$ và (6) cho $(\kappa + ik_0)$

$$-(\kappa + ik_0)(\kappa - ik_0)e^{\kappa a}B + (\kappa - ik_0)^2 e^{\kappa a}B' + 2ik_0.(\kappa - ik_0)e^{\kappa a} = 0, \tag{9}$$

$$-(\kappa - ik_0)(\kappa + ik_0)e^{\kappa a}B + (\kappa + ik_0)^2 e^{-\kappa a}B' = 0. \tag{10}$$

Lấy (10) - (9) ta tìm được B':

$$B' = \frac{-2ik_0(\kappa - ik_0)e^{\kappa a}}{(\kappa - ik_0)^2 e^{\kappa a} - (\kappa + ik_0)^2 e^{-\kappa a}}. \tag{4.82}$$

Từ (3), ta tìm được C:

$$C = \frac{4ik_0\kappa e^{-ik_0 a}}{(\kappa + ik_0)^2 e^{-\kappa a} - (\kappa - ik_0)^2 e^{\kappa a}}. \tag{4.83}$$

Thực hiện một số biến đổi phần mẫu số trong biểu thức của C:

$$\begin{aligned}
MS &= (\kappa + ik_0)^2 e^{-\kappa a} - (\kappa - ik_0)^2 e^{\kappa a}, \\
&= (\kappa^2 - k_0^2 + 2ik_0\kappa)e^{-\kappa a} - (\kappa^2 - k_0^2 - 2ik_0\kappa)e^{\kappa a}, \\
&= (\kappa^2 - k_0^2)(e^{-\kappa a} - e^{\kappa a}) + 2ik_0\kappa(e^{-\kappa a} + e^{\kappa a}), \\
&= -(\kappa^2 - k_0^2)2\mathrm{sh}\kappa a + 2ik_0\kappa 2\mathrm{ch}\kappa a.
\end{aligned}$$

Từ đó, ta được:

$$C = \frac{-2ik_0\kappa e^{-ik_0 a}}{(\kappa^2 - k_0^2)\mathrm{sh}(\kappa a) - 2ik_0\kappa\mathrm{ch}(\kappa a)}. \tag{4.84}$$

$$|C|^2 = C^*C = \frac{4k_0\kappa}{[(\kappa^2 - k_0^2)\mathrm{sh}(\kappa a) - 2ik_0\kappa\mathrm{ch}(\kappa a)][(\kappa^2 - k_0^2)\mathrm{sh}(\kappa a) + 2ik_0\kappa\mathrm{ch}(\kappa a)]}.$$

Cuối cùng ta được hệ số truyền qua:

$$D = |C|^2 = C^*C = \frac{4k_0\kappa}{(\kappa^2 - k_0^2)^2\mathrm{sh}^2(\kappa a) + 4k_0^2\kappa^2}. \tag{4.85}$$

Xét trường hợp $\kappa a >> 1$ thì sh$\kappa a = (1/2)(e^{\kappa a} - e^{-\kappa a}) = (e^{\kappa a}/2)$, nên

$$T = \frac{16e^{-2\kappa a}}{(k_0^2 + \kappa^2)/(k_0\kappa^2)}. \tag{4.86}$$

Đặt T_0 là hệ số đứng trước hàm $e^{-2\kappa a}$ thì biểu thức (4.86) được viết lại như sau:

$$T = T_0 e^{-2\kappa a}. \tag{4.87}$$

Thay biểu thức của κ vào (4.87) ta được

$$T = T_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}.a\right), \tag{4.88}$$

trong đó $T_0 = 16n^2/(1+n^2)^2$, với $n = \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{U_0-E}{E}}$.

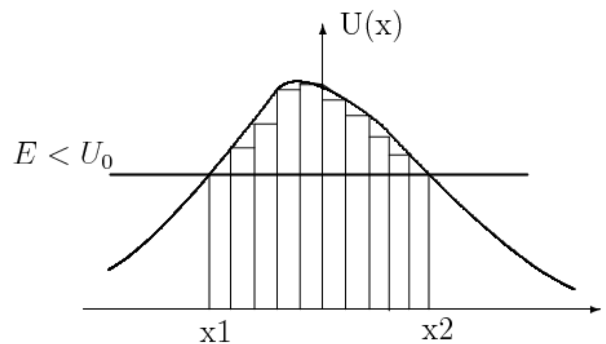
Như vậy, khi $E < U_0$ hạt cũng có thể xuyên qua hàng rào thế bằng hiệu ứng đường ngầm. Dễ dàng nhận thấy rằng hiệu ứng đường ngầm chỉ xảy ra đối với các hiện tượng vi mô.

Thật vậy, giả sử chọn $U_0 - E = 1,28.10^{-31}$ J, $m = 9,8.10^{-31}$ kg (khối lượng electron), ta có sự phụ thuộc của T vào giá trị của a như sau:

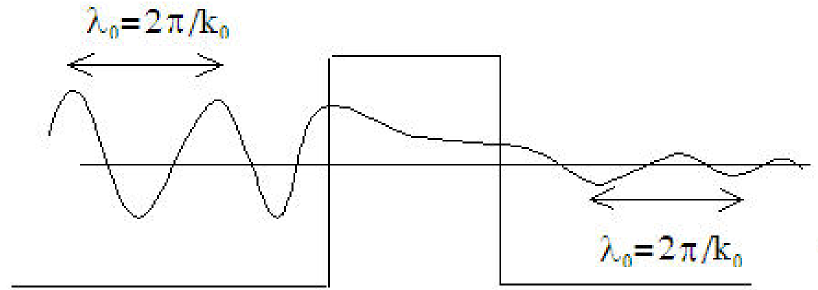
a(m)	10^{-10}	$1,5.10^{-10}$	$2,0.10^{-10}$	$5,0.10^{-10}$
T	$0,1$	$0,03$	$0,008$	$5,0.10^{-7}$

Như vậy, hiệu ứng đường ngầm là một hiện tượng biểu hiện rõ tính chất sóng của hạt vi mô, điều này không thể có đối với hạt vĩ mô. Công thức (4.88) chỉ áp dụng cho hàng rào thế dạng hình chữ nhật. Đây là một trường hợp lý tưởng.

Trong trường hợp dạng thế có dạng như ở hình 4.16 ta cũng có thể áp dụng công thức trên bằng cách chia hàng rào thế này này vô số các hàng rào thế vuông góc rộng dx, cao U(x). Hạt có



Hình 4.16: Hàng rào thế có dạng bất kỳ



Hình 4.15: Hàm sóng của hạt có năng lượng $E < U_0$ khi đi qua hàng rào thế

năng lượng E đi vào hàng rào thế tại
điểm $x = x_1$ và ra khỏi hàng rào tại $x = x_2$. Khi đó, công thức tính hệ số truyền qua áp dụng cho một hàng rào thế bất kỳ có dạng:

$$T = T_0 \exp\Big(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[U(x)-E]}dx\Big). \tag{4.89}$$

Hiệu ứng đường ngầm mới thoạt nhìn có vẽ như mâu thuẫn với định luật bảo toàn năng lượng. Khi hạt có năng lượng E đi vào miền thế năng $U(x) > E$ thì động năng $E_k = E - U(x)$ có giá trị âm và xung lượng của hạt là đại lượng ảo (?). Đây là một điều không thể xảy ra theo cơ học cổ điển. Thực ra vấn đề ở đây không có gì mâu thuẫn cả.

Cơ học lượng tử cho rằng năng lượng của hạt không thể là tổng động năng và thế năng của hạt vì theo nguyên lý bất định Heisenberg thì xung lượng (động năng) và tọa độ (thế năng) của hạt không đồng thời xác định. Năng lượng của hạt chính là trị riêng của toán tử Hamilton khi thế năng không phụ thuộc tường minh vào thời gian (xem Chương III).

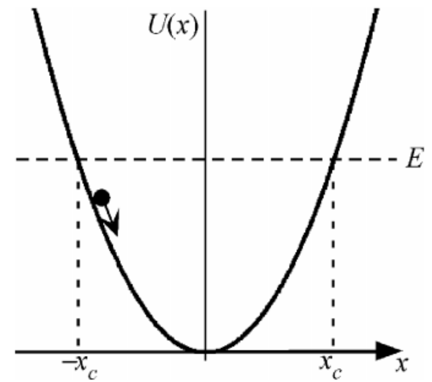
Hiệu ứng đường ngầm được ứng dụng rộng rãi để giải thích các hiện tượng vật lý như: sự phát electron lạnh, sự phân rã alpha, hoạt động của diode tunnel..., mà việc khảo sát chúng không nằm trong phạm vi của giáo trình này.

6.8 DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA LƯỢNG TỬ

Dao động điều hoà là một dạng chuyển động rất quan trọng trong vật lý nói chung và vật lý hạt vi mô nói riêng. Đó là dao động của các ion hoặc nguyên tử quanh vị trí cân bằng trong mạng tinh thể, dao động của các nguyên tử trong phân tử... Bài toán về dao động điều hoà lượng tử được ứng dụng nhiều trong vật lý lý thuyết như lý thuyết bức xạ cân bằng, lý thuyết phổ, lý thuyết nhiệt dung của vật rắn... Trước hết ta xét trường hợp dao động tử điều hoà một chiều với thế năng có dạng parabol đối xứng (Hình 4.17):

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Theo quan điểm cổ điển hạt sẽ chuyển động dao động với biên độ phụ thuộc vào cơ năng ban đầu E. Cơ năng này có thể cung cấp cho hạt dưới dạng thế năng (độ lệch ban đầu), dưới dạng động năng (vận tốc ban đầu), hoặc cả thế năng và động năng ban đầu. Nếu bỏ qua mọi sự hao hụt về năng lượng thì trong quá trình chuyển động, động năng và thế năng có thể thay đổi nhưng tổng của chúng là một đại lượng không đổi và bằng năng lượng ban đầu E. Đối với một giá trị bất kỳ của E sẽ có hai giới hạn của biên độ dao động, được xác định bởi $x = \pm x_C$ (điểm lùi cổ điển). Sau đây ta sẽ giải bài toán dao động tử điều hòa lượng tử bằng phương pháp giải tích.



Hình 4.17: Sơ đồ thế năng của dao động tử điều hòa. Tại các điểm lùi cổ điển $x = x_C$ hạt có năng lượng toàn phần E.

Phương trình Schrodinger không phụ thuộc thời gian có dạng

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x). \qquad (4.90)$$

Để giải phương trình này ta dùng phương pháp đổi biến số:

$$\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2}x, \quad \lambda = 2E/\hbar\omega.$$

Lúc đó phương trình (4.90) trở thành:

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi(\xi) = 0. \qquad (4.91)$$

Phương trình trên cho nghiệm thoả mãn các điều kiện tiêu chuẩn của hàm sóng chỉ ứng với một giá trị xác định của λ tức là của năng lượng E.

Để tìm nghiệm của (4.91) trước hết ta xét các nghiệm tiệm cận:

- Khi $\xi \to \pm\infty$ thì (4.91) trở thành:

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) = 0. \qquad (4.92)$$

Nghiệm của phương trình này là:

$$\psi(\xi) = e^{+\xi^2/2} + e^{-\xi^2/2}.$$

Do điều kiện giới nội của hàm sóng nên ta chỉ chọn số hạng $e^{-\xi^2/2}$.

- Khi ξ có giá trị bất kỳ nghiệm của (4.91) có dạng:

$$\psi(\xi) = Ae^{-\xi^2/2}f(\xi),$$

trong đó $f(\xi)$ là hàm cần tìm. Lấy đạo hàm bậc hai của ψ theo ξ rồi thay vào (4.91) ta được phương trình:

$$f"(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (\lambda - 1)f(\xi) = 0. \qquad (4.93)$$

Ta tìm nghiệm của (4.93 dưới dạng chuỗi:

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k. \qquad (4.94)$$

Lấy đạo hàm bậc nhất rồi bậc hai của $f(\xi)$, ta được:

$$f'(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} ka_k\xi^{k-1},$$

$$f"(\xi) = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k\xi^{k-2}.$$

Thay $f(\xi), f'(\xi), f"(\xi)$ vào (4.93) và đưa các số hạng về cùng tổng $\sum_{k=0}^{\infty}...$ ta được:

$$\sum_{k=0}^{\infty}[(k+2)(k+1)a_{k+2} - 2ka_k + (\lambda - 1)a_k] = 0.$$

Từ đó, ta suy ra công thức truy toán dùng để xác định các hệ số a_k:

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k. \tag{4.95}$$

Theo hệ thức (4.95), nếu ta biết a_k thì sẽ tìm được a_{k+2}, rồi a_{k+4}...
Ví dụ:
+ Nếu bắt đầu từ a_0 ta sẽ tìm được các hệ số với k chẵn:

$$a_2 = \frac{1-\lambda}{2}a_0, \quad a_4 = \frac{5-\lambda}{12}a_2 = \frac{(5-\lambda)(1-\lambda)}{24}a_0, \ldots.$$

+ Nếu bắt đầu từ a_1 ta sẽ tìm được các hệ số với k lẻ:

$$a_3 = \frac{3-\lambda}{2}a_1, \quad a_5 = \frac{7-\lambda}{20}a_3 = \frac{(7-\lambda)(3-\lambda)}{120}a_1, \ldots.$$

Khi $\xi \to \infty$ để đảm bảo điều kiện giới nội của hàm sóng thì chuỗi (4.94) phải bị chặn ở một số hạng nào đó, nghĩa là trở thành một đa thức. Giả sử bậc của đa thức là n, lúc đó $a_n \neq 0, a_{n+2} = 0$, công thức truy toán bây giờ trở thành:

$$2n + 1 - \lambda = 0 \Rightarrow \lambda = 2n + 1.$$

Như vậy, ta được biểu thức của năng lượng:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \text{ với } n = 0, 1, 2... \tag{4.96}$$

Công thức (4.96) chứng tỏ năng lượng của dao động tử điều hòa có giá trị gián đoạn. Năng lượng thấp nhất của dao động tử ứng với $n = 0$ là

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{4.97}$$

được gọi là "năng lượng không".

Năng lượng này có liên quan đến dao động của các hạt (nguyên tử, ion...) ở nút mạng tinh thể. Theo cơ học lượng tử thì ngay cả khi nhiệt độ tiến đến không độ tuyệt đối ($T \to 0K$) các hạt vẫn dao động, do đó có năng lượng.

Sự tồn tại của "năng lượng không" đã được thực nghiệm xác nhận nhờ thí nghiệm tán xạ tia X lên tinh thể ở nhiệt độ thấp. "Năng lượng không" cũng là kết quả trực tiếp của hệ thức bất định. Thực vậy, nếu ở T = 0 K hạt không dao động thì tọa độ và xung lượng được đồng thời xác định, điều này trái với hệ thức bất định.

Bây giờ ta tìm hàm sóng ứng với năng lượng E_n. Hàm sóng này có dạng:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\xi^2/2} f(\xi). \tag{4.98}$$

So sánh phương trình (4.93) với phương trình cho đa thức Hermite (xem phần phụ lục) ta thấy $f(\xi)$ chính là đa thức Hermite.

$$f_n(\xi) = H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \tag{4.99}$$

Hệ số A_n được xác định từ điều kiện chuẩn hoá:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(\xi)|^2 d\xi (\sqrt{\hbar/m\omega}) = 1.$$

Dùng điều kiện trực giao của đa thức Hermite:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n!$$

ta tìm được:

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} (m\omega/\hbar\pi)^{1/4}.$$

Như vậy, hàm sóng ứng với năng lượng E_n có dạng:

$$\psi(\xi) = (m\omega/\hbar\pi)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} e^{-\xi^2} H_n(\xi). \tag{4.100}$$

Bây giờ ta chuyển qua biến x:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{(-m\omega/2\hbar)x^2} H_n(\sqrt{m\omega/\hbar} x). \tag{4.101}$$

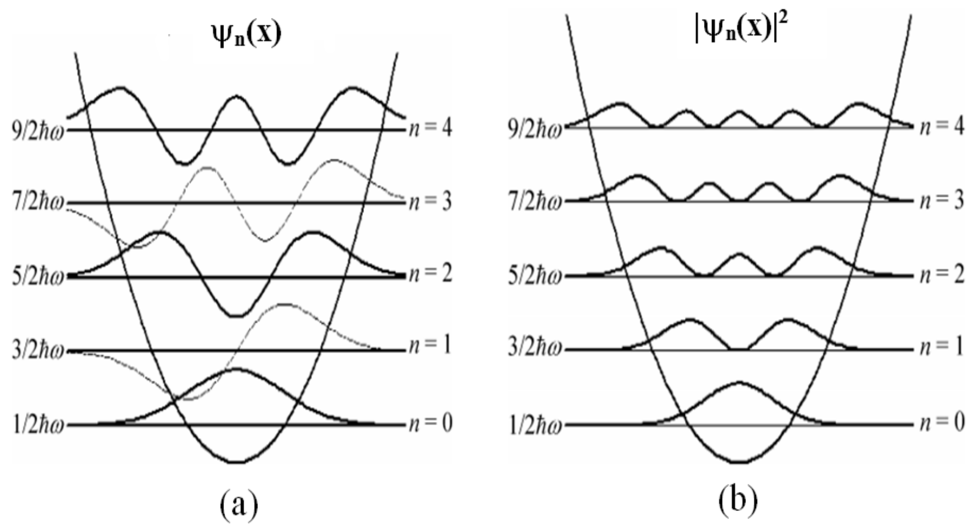
Nếu ta đặt $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$ thì hàm sóng ứng với một số mức năng lượng khác nhau sẽ là:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\exp(-x^2/2x_0^2), \tag{4.102}$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\exp(-x^2/2x_0^2)2(x/x_0), \tag{4.103}$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2^2x_0\sqrt{\pi}}}\exp(-x^2/2x_0^2)(4x^2/x_0^2). \tag{4.104}$$

Ta định nghĩa điểm mà tại đó hàm sóng $\psi_n(x) = 0$ là nút, thì hàm $\psi_0(x)$ có 0 nút, hàm $\psi_1(x)$ có 1 nút...Nói chung số nút chính là số lượng tử n. Đồ thị các hàm sóng và xác suất tìm hạt tương ứng với 4 mức năng lượng thấy nhất được diễn tả ở Hình 4.18.



Hình 4.18: Hàm sóng (đồ thị (a)) và mật độ xác suất tìm hạt (đồ thị (b)) của hạt dao động điều hòa ứng với 4 mức năng lượng khác nhau.

Ví dụ 6.8.1:

Tìm các mức năng lượng của hạt khối lượng m chuyển động trong trường thế năng có dạng:

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & \text{khi} \quad x \leq 0, \\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & \text{khi} \quad x > 0. \end{cases}$$

Lời giải:

Đây là bài toán dao động tử điều hòa không đối xứng trong đó hạt chỉ chuyển động trong miền $x > 0$. Như vậy, nghiệm của phương trình Schrodinger cho bài toán là những nghiệm triệt tiêu ở $x = 0$. Đây là nghiệm lẻ (n'=2n+1) của bài toán dao động tử điều hòa đối xứng vì chỉ các nghiệm dạng $\psi_{2n+1}(x)$ mới triệt tiêu tại $x = 0$.

Vì vậy, năng lượng của bài toán không đối xứng cho các giá trị năng lượng với n lẻ, nghĩa là:

$$E_n = \left[n' + \frac{1}{2}\right]\hbar\omega = \left[(2n+1) + \frac{1}{2}\right]\hbar\omega = \left(2n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega,$$

trong đó $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

§ 7 PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER TRONG CHUYỂN ĐỘNG 3 CHIỀU

Bây giờ ta xét tường hợp hạt chuyển động không phải trên một đường thẳng mà trên một mặt phẳng 2 chiều hoặc trong không gian Descartes 3 chiều. Để giải phương trình Schrodinger cho chuyển động nhiều chiều này ta dùng phương pháp tách biến bằng cách giả sử chuyển động trên các chiều là độc lập nhau. Hệ quả của điều này là năng lượng trong chuyển động nhiều chiều bằng tổng năng lượng của các chuyển động 1 chiều và hàm sóng trong chuyển động nhiều chiều bằng tích các hàm sóng của các chuyển động một chiều. Vì vậy, ta sẽ sử dụng kết quả của bài toán của chuyển động một chiều đã khảo sát ở trên. Điều cần chú ý ở đây là khác với trường hợp 1 chiều, trong chuyển động nhiều chiều sẽ xuất hiện sự suy biến của năng lượng.

Trong mục này, trước hết ta đưa ra cách giải tổng quát phương trình Schrodinger trong trường hợp 3 chiều trong tọa độ Descartes bằng phương pháp tách biến, sau đó ta sẽ xét bài toán hố thế 2 chiều, 3 chiều và bài toán dao động tử trong trường hợp 3 chiều.

7.1 GIẢI PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER TRONG TRƯỜNG HỢP BA CHIỀU

Trong không gian Descartes 3 chiều ta đặt $x = x_1, y = x_2, z = x_3$, lúc đó phương trình Schrodinger dừng có dạng

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x_1,x_2,x_3)\Big)\psi(x_1,x_2,x_3) = E\psi(x_1,x_2,x_3) \tag{4.105}$$

Sử dụng phương pháp tách biến ta viết biểu thức của thế năng dưới dạng:

$$V(x_1,x_2,x_3) = V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3), \tag{4.106}$$

thay vào phương trình (4.105), ta được

$$\sum_{i=1}^{3}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + V_i(x_i)\Big)\psi(x_1,x_2,x_3) = E\psi(x_1,x_2,x_3). \tag{4.107}$$

Trong phương pháp phân ly biến số, hàm sóng và năng lượng có thể viết lại như sau:

$$\psi(x_1,x_2,x_3,...) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3),\ E = E_1 + E_2 + E_3. \tag{4.108}$$

Thay (4.108) vào phương trình (4.107) rồi chia 2 vế cho $\psi(x_1,x_2,x_3)$, ta được:

$$\sum_{i=1}^{3}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i\psi_i(x_i) + V_i(x_i)\Big)\frac{1}{\psi_i(x_i)} = E_1 + E_2 + E_3. \tag{4.109}$$

Từ đó, phương trình (4.109) có thể tách thành 3 phương trình một chiều riêng rẽ có nghiệm đã biết

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i\psi_i(x_i) + V_i(x_i)\Big)\psi_i(x_i) = E_i\psi_i(x_i). \tag{4.110}$$

Tóm lại, năng lượng và hàm riêng tương ứng của hạt trong chuyển động 3 chiều trong không gian Descartes là:

$$\mathrm{E}_{n_xn_yn_z}= \mathrm{E}_{\mathrm{n_x}}+\mathrm{E}_{\mathrm{ny}}+\mathrm{E}_{\mathrm{n_z}};\quad \psi_{n_xn_yn_z}(x,yz) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \tag{4.111}$$

Dạng của năng lượng E_{n_i} và hàm sóng $\psi_{n_i}(x_i)$ phụ thuộc vào dạng của thế năng $U(x_i)$.

7.2 HẠT TRONG GIẾNG THẾ 2 CHIỀU

Trong trường hợp hạt bị nhốt trong giếng thế với thế năng có dạng:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq L_x, \ \ 0 \leq y_x \leq L_y, \\ \infty & \text{khi } \ x < 0, x > L_x; y < 0, y > L_y. \end{cases}$$

Phương trình Schrodinger cho hạt trong giếng thế 2 chiều có dạng:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2}\right)\psi(x,y) = E\psi(x,y).$$

Ta giải phương trình này bằng phương pháp phân ly biến số:

$$\psi(x,y) = \psi(x).\psi(y); \ E = E_x + E_y.$$

Lúc đó phương trình trên được tách thành 02 phương trình cho trường hợp 1 chiều:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E_x\psi(x); \ \ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}\psi(y) = E_y\psi(y).$$

Từ công thức của năng lượng và hàm sóng trong trường hợp giếng thế 1 chiều ta được năng lượng và hàm sóng trong giếng thế 2 chiều như sau:

$$E_{n_x n_y} = E_{n_x} + E_{n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right). \qquad (4.112)$$

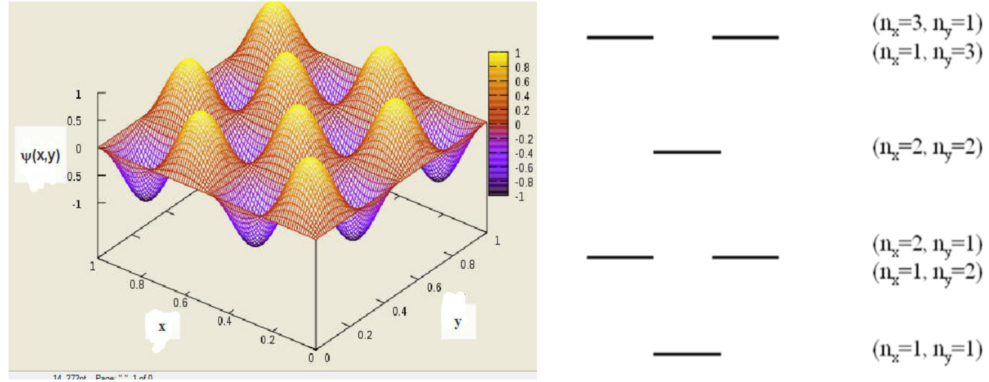
$$\psi_{n_x,n_y}(x,y) = \sqrt{\frac{4}{L_x L_y}}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right). \qquad (4.113)$$

Khi giếng là hình vuông cạnh L thì:

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2), \quad \psi_{n_x,n_y}(x,y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L}\right). \qquad (4.114)$$

Giá trị năng lượng ứng với 4 mức đầu tiên là:

$$\begin{aligned} &E_{11} = \hbar^2\pi^2/mL^2; \ E_{12} = E_{21} = 5\hbar^2\pi^2/2mL^2, \\ &E_{22} = 4\hbar^2\pi^2/mL^2, E_{13} = E_{31} = 5\hbar^2\pi^2/mL^2. \end{aligned} \qquad (4.115)$$



Hình 4.19: Dạng của hàm sóng của hạt trong giếng thế 2 chiều hình chữ nhật có thành cao vô hạn với $n_x = 4, n_y = 4$ (hình bên trái) và giản đồ các mức năng lượng đầu tiên (hình bên phải).

Ta thấy rằng mức năng lượng E_{11} không suy biến, hàm sóng tương ứng là $\psi_{11}(x,y) = \frac{2}{L}\sin(\frac{\pi x}{L})\sin(\frac{\pi y}{L})$. Mức năng lượng E_{12} hoặc E_{21} suy biến bội 2 ứng với 2 hàm sóng $\psi_{12}(x,y) = \frac{2}{L}\sin(\frac{\pi x}{L})\sin(\frac{2\pi y}{L})$ và $\psi_{21}(x,y) = \frac{2}{L}\sin(\frac{2\pi x}{L})\sin(\frac{\pi y}{L})$.

7.3 HẠT TRONG GIẾNG THẾ 3 CHIỀU

Trong trường hợp này thế năng giam giữ hạt có dạng:

$$U(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{khi } 0 \leq x \leq L_x, \;\; 0 \leq y \leq L_y, \;\; 0 \leq z \leq L_z, \\ \infty & \text{khi } x < 0, x > L_x; \; y < 0, y > L_y; \; z < 0, z > L_z. \end{cases}$$

Phương trình Schrodinger cho hạt trong hộp 3 chiều có dạng:

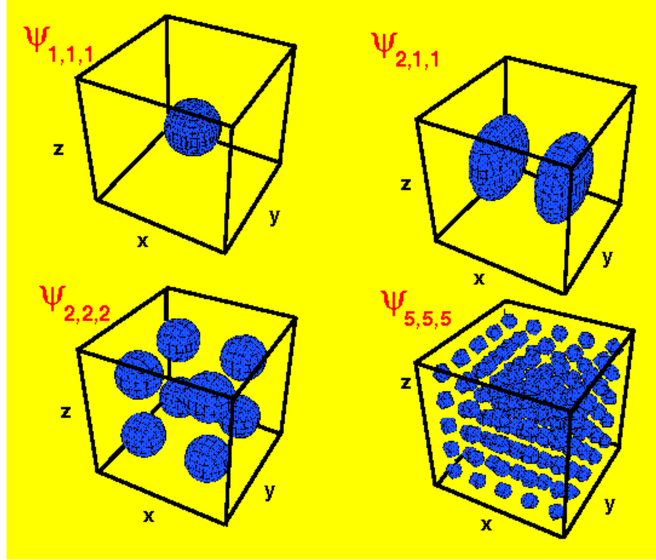
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z).$$

Sử dụng công thức (4.111), ta viết biểu thức của năng lượng và hàm sóng trong giếng thế 3 chiều như sau:

$$E_{n_x n_y n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\Big(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2}\Big). \tag{4.116}$$

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin(\frac{n_x \pi x}{L_x}) \sin(\frac{n_y \pi y}{L_y} \sin(\frac{n_z \pi z}{L_z}). \qquad (4.117)$$

Trong trường hợp $L_x = L_y = L_z = L$ thì năng lượng và hàm sóng trong (4.116)



Hình 4.20: Dạng của hàm sóng của hạt trong giếng thế 3 có thành cao vô hạn ứng với các mức năng lượng đầu tiên.

và (4.117) trở thành

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2). \qquad (4.118)$$

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin(\frac{n_x \pi x}{L}) \sin(\frac{n_y \pi y}{L} \sin(\frac{n_z \pi z}{L}). \qquad (4.119)$$

Ở trạng thái cơ bản $n_x = n_y = n_z = 1$ năng lượng có dạng

$$E_{111} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(1+1+1) = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = 3E_1, \qquad (4.120)$$

trong đó $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ là năng lượng ở trạng thái cơ bản của giếng thế 1 chiều. Sự suy biến của các mức năng lượng trong giếng thế 3 chiều được cho ở bảng 4.1, trong đó g_n là bậc suy biến.

Bảng 4.1: Sự suy biến các mức năng lượng trong giếng thế 3 chiều.

$E_{n_x n_y n_z}/E_1$	(n_x, n_y, n_z)	g_n
3	(111)	1
6	(211), (121), (112)	3
9	(221), (212), (122)	3
11	(311), (131), (113)	3
12	(222)	1
14	(321), (312), (231), (213), (132), (123)	6

7.4 DAO ĐỘNG TỬ ĐIỀU HÒA 3 CHIỀU

Ta xét hạt dao động điều hòa lượng tử với thế năng dạng:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m(\omega_x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2). \tag{4.121}$$

Nếu các tần số theo 3 chiều khác nhau ta nó trường hợp dao động tử điều hòa dị hướng, trường hợp ngược lại ta có dao động tử điều hòa đẳng hướng. Sử dụng phương pháp tách biến như trên ta được năng lượng của dao động tử 3 chiều dị hướng là:

$$E_{n_x n_y n_z} = \big(n_x + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega_x + \big(n_y + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega_y + \big(n_z + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega_z, \tag{4.122}$$

trong đó $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots$. Hàm sóng mô tả trạng thái dừng tương ứng là

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z), \tag{4.123}$$

trong đó các hàm sóng một chiều được cho ở công thức (4.101).

Trong trường hợp thế năng đẳng hướng ($\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$) thì năng lượng ở (4.122) trở thành

$$E_{n_x n_y n_z} = \big(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\big)\hbar\omega,$$

hay

$$E_n = (n + 3/2)\hbar\omega; \text{ với } n = n_x + n_y + n_z. \quad (4.124)$$

Từ (4.124) ta thấy trong trường hợp dao động điều hòa đẳng hướng năng lượng sẽ suy biến. Để tìm bậc suy biến ta tìm số hàm sóng khả dĩ ứng với một giá trị của năng lượng. Dễ dàng thấy rằng bậc suy biến ứng với mức năng lượng E_n là

$$g_n = \sum_{n_1=0}^{n} (n - n_1 + 1).$$

Đây là một cấp số cộng mà số hạng đầu là (n+1), số hạng cuối là 1, vì vậy áp dụng công thức tính tổng của cấp số cộng, ta được bậc suy biến là $g_n = (n+1)(n+2)/2$. Bảng 4.2 minh họa các giá trị các mức năng lượng và bậc suy biến của chúng.

Bảng 4.2: Sự suy biến các mức năng lượng trong dao động tử 3 chiều đẳng hướng.

n	$2E_n/(\hbar\omega)$	$(n_x n_y n_z)$	g_n
0	3	(000)	1
1	5	(100), (010), (001)	3
2	7	(200), (020), (002), (110), (101), (011)	6
3	9	(300), (030), (003) ,(210), (201), (021)	10
		(120), (102), (012), (111)	

§ 8 TÓM TẮT CHƯƠNG 4

- Sự thay đổi trạng thái của một hạt vi mô được mô tả bởi phương trình Schrodinger tổng quát

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t).$$

Khi toán tử Hamilton không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì hàm trạng thái $\Psi(\vec{r}, t)$ được tách thành hai hàm độc lập nhau: $\Psi(\vec{r}, t) =$

$\psi(\vec{r})f(t)$, trong đó $f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, $\psi(\vec{r})$ là nghiệm của phương trình Schrodinger dừng (phương trình trị riêng của toán tử năng lượng): $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$. Để giải phương trình Schrodinger tổng quát ta chỉ cần giải phương trình Schrodinger dừng sau đó sử dụng điều kiện đầu để tìm trạng thái ở một thời điểm t đã cho.

- Khi hạt chuyển động hoàn toàn tự do (không bị liên kết) thì năng lượng của hạt có giá trị liên tục và hàm sóng có dạng sóng phẳng De Broglie. Khi chuyển động của hạt bị giới hạn thì sẽ xuất hiện các trạng thái liên kết, ở đó năng lượng bị lượng tử hóa (bài toán hố thế vô hạn hoặc hữu hạn, bài toán dao động điều hòa). Năng lượng thấp nhất của hạt không bằng không mà có một giá trị nào đó, ($E_1 = \hbar^2\pi^2/2mL^2$) đối với giếng thế, hoặc $E_0 = \hbar\omega/2$ đối với dao động tử điều hòa.

- Khi hạt bị nhốt trong giếng thế sâu vô hạn thì hạt không có khả năng "thấm qua" thành giếng. Tuy nhiên, đối với giếng thế có độ sâu hữu hạn thì có một xác suấtnào đó để hạt đi vào miền cấm cổ điển (có động năng âm), nghĩa là có thể thấm qua thành giếng. Đây là một hiêu ứng đặc thù trong cơ lượng tử, được gọi là hiệu ứng đường ngầm.

§ 9 BÀI TẬP CHƯƠNG 4

1. Hạt ở trong hố thế một chiều vuông góc có bề rộng L. Chứng minh rằng ở trạng thái thứ n thì xác suất tìm hạt giữa miền x = 0 và x = L/n là 1/n.

2. Hạt ở trong giếng thế một chiều vuông góc sâu vô hạn có bề rộng L và có trạng thái $\psi(x) = A\sin^2(\pi x/L)$. Hãy xác định xác suất đo năng lượng của hạt ở trạng thái cơ bản.

3. Hạt trong giếng thế một chiều sâu vô hạn có bề rộng L, có trạng thái được

mô tả bởi hàm sóng $\psi(x) = Ax(L - x)$. Hãy tìm phân bố xác suất của năng lượng, các giá trị trung bình $\overline{E}$ và $\overline{E^2}$.

4. Hạt trong hố thế một chiều vuông góc sâu vô hạn có bề rộng a. Chứng minh: $\overline{x} = \frac{1}{2}a, \quad \overline{(\Delta x)^2} = \dfrac{a}{12}(1 - \dfrac{6}{\pi^2 n^2})$

5. Xác định phân bố xác suất của xung lượng của một hạt trong giếng thế 1 chiều vuông góc sâu vô hạn ở trạng thái cơ bản (n=1), bề rộng của giếng là a.

6. Tìm hàm sóng và mức năng lượng của các trạng thái dừng của 1 electron dao động điều hoà trong điện trường đều $\vec{\varepsilon} = (\varepsilon, 0, 0)$.

7. Tại thời điểm $t = 0$ hàm sóng của 1 dao động tử điều hòa một chiều là:

$$\Psi(x,0) = A\sum_n (1/\sqrt{2})^n \psi_n(x),$$

trong đó $\psi_n(x)$ là hàm riêng của toán tửnăng lượng.

a) Tìm hệ số chuẩn hóa A.

b) Tìm biểu thức của hàm sóng tại thời điểm t.

c) Tìm trị trung bình của năng lượng tại $t = 0$.

8. Chứng minh rằng sự tồn tại năng lượng không trong dao động tử điều hòa lượng tử có thể suy ra từ hệ thức bất định Heisenberg.

9. Hàm sóng của một hạt trong giếng thế một chiều vuông góc có bề rộng L, có thành cao vô hạn ở thời điểm ban đầu có dạng $\Psi(x, 0) = Ax(L - x)$. Tìm hàm sóng $\Psi(x, t)$ tại một thời điểm bất kỳ.

10. Trạng thái của một quay tử phẳng được mô tả như thế nào nếu tại t=0 nó được mô tả bằng hàm sóng $\Psi(\varphi, 0) = A\sin^2\varphi$.

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. Hàm sóng chuẩn hóa ở trạng thái thứ n có dạng: $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x$.
   Dùng công thức tính xác suất tìm hạt trong miền $x = [0, L/n]$:
   $$W = \int_0^{L/n} |\psi_n(x)|^2 dx,$$
   tính ra ta sẽ được kết quả: $W_{[0,L/n]} = 1/n$.

2. a) Dùng điều kiện chuẩn hóa để tìm A: $1 = |A|^2 \int_0^L (\sin^2\frac{\pi x}{L})^2 dx$.
   Dùng công thức hạ bậc lũy thừa của hàm lượng giác: $\sin^2 x = \dfrac{1-\cos 2x}{2}$, rồi tính tích phân trên ta được: $A = \sqrt{\frac{8}{3L}}$.
   Xác suất đo năng lượng của hạt được tính theo công thức:
   $w_n(E_n) = |c_n|^2 = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$, trong đó $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\dfrac{n\pi x}{L}$.
   Thay vào công thức trên cho trường hợp trạng thái cơ bản $n = 1$, ta được:
   $$c_1 = \sqrt{\frac{8}{3L}}\int_0^L \sin^3\frac{\pi x}{L}dx.$$
   Sử dụng công thức lượng giác: $\sin^3 x = \dfrac{3\sin x - \sin 3x}{4}$, ta tính được: $w_1(E_1) = |c_1|^2 = \dfrac{256}{27\pi^2} = 0,96$.

3. a) Sử dụng điều kiện chuẩn hóa ta tính được: $A = \sqrt{30/L^5}$.
   b) Phân bố xác suất đo năng lượng: $w_n(E_n) = |c_n|^2 = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$, trong đó $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\dfrac{n\pi x}{L}$.
   Ta cần tính tích phân:
   $$c_n = A(\sqrt{2/L})\int_0^L \sin\frac{n\pi x}{L}x(L-x)dx,$$
   $$c_n = A(\sqrt{2/L})\Big(L\int_0^L x\sin\frac{n\pi x}{L}dx - \int_0^L x^2\sin\frac{n\pi x}{L}dx\Big).$$
   Khi tính hai tích phân này, ta chú ý rằng $\cos n\pi = (-1)^n$; $\sin n\pi = 0$, ta được kết quả:
   $$w_n = \frac{240}{n^6\pi^6}[1-(-1)^n]^2.$$

c) Các giá trị trung bình $\overline{E}$ và $\overline{E^2}$ có thể tính theo các công thức:

$$\overline{A} = \sum_n a_n w_n, \overline{A^2} = \sum_n a_n^2 w_n.$$

$$+\overline{E} = \sum_n E_n w_n(E_n)$$
$$= \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}\frac{240}{n^6\pi^6}[1-(-1)^n]^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\frac{960}{\pi^6}\sum_{n=1,3,5}\frac{1}{n^4}.$$

Sử dụng công thức: $\sum_{n=1,3,5}\frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{96}$, ta tính được: $\overline{E} = \frac{5\hbar^2}{mL^2}$.

$$+\overline{E^2} = \sum_n (E_n)^2 w_n(E_n)$$
$$= \sum_n \left(\frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}\right)^2\frac{240}{n^6\pi^6}[1-(-1)^n]^2 = \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\right)^2\frac{960}{\pi^6}\sum_{n=1,3,5}\frac{1}{n^2}.$$

Sử dụng công thức: $\sum_{n=1,3,5}\frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{8}$, ta tính được: $\overline{E^2} = \frac{30\hbar^4}{m^2L^4}$.

Ghi chú: Ta cũng có thể sử dụng công thức tính trị trung bình theo cơ lượng tử để tính trị trung bình của E và E^2:

$$\overline{E} = \int_V \psi^*\hat{H}\psi dV \text{ và } \overline{E^2} = \int_V \psi^*\hat{H}^2\psi dV = \int_V (\hat{H}\psi)^*\hat{H}\psi dV,$$

trong đó: $\psi = Ax(L-x)$ và $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$.

4. Dùng công thức tính trị trung bình: $\overline{A} = \int_V \psi^*\hat{A}\psi dV$.
Trong bài toán này: $\psi = \psi_n(x) = \sqrt{(2/a)}\sin\frac{n\pi x}{a}; \hat{x} = x; \widehat{x^2} = x^2$, như vậy ta có:

$$\overline{x} = (2/a)\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx \quad \text{và} \quad \overline{x^2} = (2/a)\int_0^a x^2\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx.$$

Dùng công thức $\sin^2 x = \frac{1-\cos 2x}{2}$; $\cos^2 x = \frac{1+\cos 2x}{2}$ và tính các tích phân này ta được: $\overline{x} = 1/2a$, $\overline{(\Delta x)^2} = \frac{a}{12}(1-\frac{6}{\pi^2 n^2})$.

5. Mật độ xác suất đo xung lượng được tính theo công thức:
   $\rho(p) = |c_p|^2$, với $c_p = \langle\psi_p(x)|\psi_1(x)\rangle$,
   trong đó: $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$; $\psi_1(x) = \sqrt{(2/a)}\sin(\pi x/a)$.
   Trước hết, ta tính hệ số c_p:
   $$c_p = \sqrt{(2/a)}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a e^{-\frac{i}{\hbar}p_x x}\sin(\pi x/a).$$
   Dùng công thức Euler: $\sin\frac{\pi x}{a} = \dfrac{e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a}}{2i}$.
   Thực hiện phép tính tích phân ta được:
   $$c_p = \frac{\hbar^{3/2}\sqrt{\pi a}}{(\hbar\pi)^2 - (pa)^2}(1 + e^{-\frac{ipa}{\hbar}}).$$
   Chú ý rằng $\cos(pa/\hbar) = 1 - 2\sin^2(pa/\hbar)$, ta được:
   $$\rho(p) = |c_p|^2 = c_p^* c_p = \frac{4\pi a\hbar^3}{(p^2a^2 - \hbar^2\pi^2)^2}\cos^2(pa/2\hbar).$$

6. Hạt dao động điều hòa trong điện trường $\vec{\varepsilon}$ có thêm một thế năng phụ do tương tác với điện trường là:
   $U'(x) = -e\varepsilon x$. Như vậy, thế năng của dao động tử điều hòa trong điện trường có dạng:
   $$U(x) = m\omega^2 x^2/2 - e\varepsilon x.$$
   Viết phương trình Schrodinger với thế năng như trên, sau đó đổi biến số:
   $$X = x - e\varepsilon/m\omega^2.$$
   Ta sẽ biến đổi phương trình Schrodinger theo biến x về phương trình theo biến X, có dạng:
   $$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2\right)\psi(X) = E\psi(X),$$
   trong đó: $E'_n = E_n + e^2\varepsilon^2/2m\omega^2$.
   Giải phương trình trên ta được:$E' = E'_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$. Như vậy, năng lượng của dao động tử trong điện trường là:
   $$E_n = E'_n - e^2\varepsilon^2/2m\omega^2 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - e^2\varepsilon^2/2m\omega^2,\ n = 0, 1, 2, 3...$$

7. + Sử dụng điều kiện chuẩn hoá:

$$\langle \Psi(x,0)|\Psi(x,0)\rangle = |A|^2 \sum_{m,n} (1/2)^{(m+n)/2} \langle \psi_n|\psi_m\rangle,$$

tính ra, ta được $A = 1/\sqrt{2}$.

+ Hàm sóng phụ thuộc thời gian có dạng:

$$\Psi(x,t) = \Psi(x,0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \sum_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1} e^{i\omega t(n+\frac{1}{2})}\psi_n(x).$$

+ Trị trung bình của năng lượng là:

$$\begin{aligned}\overline{E} &= \langle \Psi(x,0)|\hat{H}|\Psi(x,0)\rangle = \sum_{m,n} \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{m+n}{2}+1} \langle \psi_n|\hat{H}|\psi_m\rangle \\ &= \sum_{m,n} \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{m+n}{2}+1} \left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\delta_{nm} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^{n+1}} \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega.\end{aligned}$$

Tính ra, ta được: $\overline{E} = 3\hbar\omega/2$.

8. + Trị trung bình của năng lượng là:

$$\overline{E} = \langle \psi(x)\left|\widehat{H}\right|\psi(x)\rangle = \langle \psi(x)\left|\left(\frac{\widehat{p^2}_x}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\right|\psi(x)\rangle = \frac{1}{2m}\overline{p_x^2} + \frac{m\omega^2}{2}\overline{x^2}.$$

Vì: $\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - (\overline{x})$ và $\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} - (\overline{p_x})$,

nên:

$$\overline{E} \geq \frac{1}{2m}\overline{(\Delta p_x)^2} + \frac{m\omega^2}{2}\overline{(\Delta x)^2}.$$

Sử dụng hệ thức bất định Heisenberg: $\overline{(\Delta x)^2}\;\overline{(\Delta p_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$, ta được:

$$\overline{E} \geq \frac{\hbar^2}{8m\overline{(\Delta x)^2}} + \frac{m\omega^2}{2}\overline{(\Delta x)^2} \qquad (*).$$

Vế phải của (*) là một hàm của $\overline{(\Delta x)^2}$. Đặt $\overline{(\Delta x)^2} = \xi$ thì vế phải của (*) trở thành:

$$f(\xi) = \frac{\hbar^2}{8m\xi} + \frac{m\omega^2}{2}\xi \qquad (**).$$

Lấy đạo hàm của (**) và cho bằng không, ta được $\xi_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}$.

Từ đó giá trị cực tiểu của năng lượng (chính là "năng lượng không") là:

$$E_{min} = E_0 = \frac{\hbar^2}{8m\xi_0} + \frac{m\omega^2}{2}\xi_0 = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

9. Nghiệm tổng quát $\Psi(x,t)$ là tổ hợp tuyến tính của các nghiệm riêng $\psi_n(x,t)$:

$$\Psi(x,t) = \sum_n C_n\psi_n(x,t) = \sum_n C_n\psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt},$$

trong đó:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(n\pi x/L),\ \Psi(x,0) = \sum_n C_n\psi_n(x).$$

Hệ số c_n được tính từ công thức: $c_n = \int_0^L \psi_n^*(x)\Psi(x,0)dx$, tính ra ta được: $c_n = \frac{2}{\pi^3}\sqrt{60}\frac{1}{n^3}[1-(-1)^n]$.

Từ đó hàm sóng tổng quát có dạng:

$$\Psi(x,t) = \frac{4}{\pi^3}\sum_n \frac{1}{n^3}\sqrt{\frac{30}{L}}\sin(n\pi x/L)e^{-\frac{i\hbar\pi^2}{2m}n^2t}[1-(-1)^n].$$

10. Rotator phẳng có nghiệm dừng và năng lượng là:

$$\psi_m(\varphi,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}e^{-\frac{i\hbar m^2t}{2I}},$$

với I là momen quán tính của hệ.

Thực hiện tương tự như bài trên, ta được nghiệm tổng quát:

$$\Psi(\varphi,t) = \frac{1}{\sqrt{3\pi}}\left\{1-\cos 2\varphi.e^{-\frac{2i\hbar t}{I}}\right\}.$$

Chương 5

Sự thay đổi các đại lượng động lực theo thời gian

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là khảo sát sự thay đổi của một đại lượng động lực của một hạt vi mô theo thời gian. Theo Tiên đề 2 một đại lượng động lực được biểu diễn bằng một toán tử nên việc tìm phương trình biểu diễn sự thay đổi của toán tử theo thời gian mà mục tiêu chủ yếu của chương này. Phần lớn nội dung của chương dành cho việc tìm các phương trình chuyển động và các định luật bảo toàn trong cơ lượng tửvà chứng minh sự tương đương của chúng đối với cơ học cổ điển.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ nắm được ý nghĩa của trị trung bình trong phép đo một đại lượng động lực, từ đó nắm được bản chất của các định luật bảo toàn và sự liên hệ của chúng với các tính chất của không gian và thời gian.

§ 1 MỞ ĐẦU

Trong chương III ta đã đặt tương ứng một đại lượng động lực với một toán tử. Kết quả đo giá trị của đại lượng động lực được đặc trưng bởi trị riêng của toán tử tương ứng với đại lượng động lực đó. Nói chung phép đo các đại lượng động lực trong cơ lượng tử mang tính thống kê. Như vậy, đặc trưng cho độ lớn

của một đại lượng động lực chỉ có thể là trị trung bình. Vấn đề ở đây là trị trung bình sẽ thay đổi theo thời gian như thế nào. Sự thay đổi theo thời gian của trị trung bình liên quan đến sự thay đổi của toán tử theo thời gian.

Trong chương này, trước hết ta sẽ khảo sát đạo hàm của toán tử theo thời gian, sau đó sẽ khảo sát sự thay đổi một số đại lượng động lực cơ bản theo thời gian thông qua trị trung bình của chúng, cuối cùng là khảo sát các điều kiện để một đại lượng động lực là một đại lượng bảo toàn.

§ 2 ĐẠO HÀM CỦA TOÁN TỬ THEO THỜI GIAN

Ta sẽ tìm đạo hàm của toán tử $\hat{A}$ theo thời gian. Muốn vậy, ta chấp nhận mệnh đề sau:

Đạo hàm của trị trung bình của đại lượng động lực A bằng trung bình của đạo hàm của đại lượng động lực A theo thời gian, nghĩa là:

$$\frac{d}{dt}\overline{A} = \overline{\frac{dA}{dt}}. \tag{5.1}$$

Trước hết ta tính đạo hàm theo thời gian của trị trung bình của A:

$$\frac{d}{dt}\overline{A} = \langle\Psi(\vec{r},t)\Big|\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\Big|\Psi(\vec{r},t)\rangle + \langle\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}|\hat{A}|\Psi(\vec{r},t)\rangle + \langle\Psi(\vec{r},t)|\hat{A}|\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}\rangle. \tag{5.2}$$

Dùng phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian, ta có thể viết:

$$\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Psi(\vec{r},t) \quad \text{và} \quad \frac{\partial\Psi^*(\vec{r},t)}{\partial t} = +\frac{i}{\hbar}\big(\hat{H}\Psi(\vec{r},t)\big)^*, \tag{5.3}$$

thay vào (5.2) ta được:

$$\frac{d}{dt}\overline{A} = \langle\Psi(\vec{r},t)\Big|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Big|\Psi(\vec{r},t)\rangle + \frac{i}{\hbar}\Big(\langle\hat{H}\Psi(\vec{r},t)|\hat{A}(t)|\Psi(\vec{r},t)\rangle - \langle\Psi(\vec{r},t)|\hat{A}\hat{H}\Psi(\vec{r},t)\rangle\Big). \tag{5.4}$$

Do tính chất Hermite của toán tử $\hat{H}$ nên ta có thể biến đổi tích vô hướng thứ hai trong (5.4) như sau:

$$\frac{d}{dt}\overline{A} = \langle\Psi(\vec{r},t)\Big|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\Big|\Psi(\vec{r},t)\rangle + \frac{i}{\hbar}\Big(\langle\Psi(\vec{r},t)|\hat{H}\hat{A}|\Psi(\vec{r},t)\rangle - \langle\Psi(\vec{r},t)|\hat{A}\hat{H}|\Psi(\vec{r},t)\rangle\Big),$$

hay:

$$\frac{d}{dt}\overline{A} = \left\langle \Psi(\vec{r},t) \right| \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) \right) \left| \Psi(\vec{r},t) \right\rangle. \tag{5.5}$$

Mặt khác, theo định nghĩa của trị trung bình, ta có:

$$\overline{\frac{dA}{dt}} = \left\langle \Psi(\vec{r},t) \right| \frac{d\hat{A}}{dt} \left| \Psi(\vec{r},t) \right\rangle. \tag{5.6}$$

So sánh (5.5) với (5.6) và sử dụng (5.1) ta được

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}). \tag{5.7}$$

Phương trình (5.7) chính là biểu thức đạo hàm theo thời gian của toán tử $\hat{A}$. Phương trình này còn được gọi là phương trình chuyển động Heisenberg. Đối với số hạng thứ hai ta ký hiệu như sau:

$$\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}] = \{\hat{H}, \hat{A}\} \tag{5.8}$$

và được gọi là móc Poisson lượng tử. Lúc đó (5.7) trở thành:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \{\hat{H}, \hat{A}\}. \tag{5.9}$$

Trong trường hợp đại lượng động lực A không phụ thuộc tường minh vào thời gian, nghĩa là $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ thì đạo hàm của toán tử $\hat{A}$ theo thời gian chỉ đơn giản bằng móc Poisson lượng tử của toán tử $\hat{A}$ và $\hat{H}$, khi đó (5.9) có dạng đơn giản:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{A}\}. \tag{5.10}$$

§ 3 PHƯƠNG TRÌNH CHUYỂN ĐỘNG TRONG CƠ LƯỢNG TỬ. ĐỊNH LÝ ERENFEST

Phương trình (5.10) có dạng tương tự như trong cơ học cổ điển

$$\frac{dA}{dt} = [H, A], \tag{5.11}$$

trong đó [H,A] là móc Poisson cổ điển và có dạng:

$$[H,A] = \sum_i \Big(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial A}{\partial x_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial x_i}\Big). \tag{5.12}$$

Từ phương trình này ta có thể tìm được phương trình chuyển động trong cơ học cổ điển. Thật vậy, cho A = x, ta được:

$$\frac{dx}{dt} = [H,x] = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial x}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial p}. \tag{5.13}$$

Cho A = p ta được:

$$\frac{dp}{dt} = [H,p] = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial p}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x}. \tag{5.14}$$

Tương tự như trong cơ học cổ điển, phương trình (5.9) xác định sự biến thiên theo thời gian của đại lượng động lực A tương ứng với toán tử Â. Nếu các đại lượng động lực đang xét là toạ độ và xung lượng của hạt thì ta sẽ được các phương trình chuyển động như sau:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \{\hat{H},\hat{x}\} \quad \text{và} \quad \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \{\hat{H},\hat{p}_x\}. \tag{5.15}$$

Từ hai phương trình này ta có thể tìm được các phương trình diễn tả sự thay đổi theo thời gian của giá trị trung bình của tọa độ và xung lượng, thể hiện bằng định lý Erenfest với nội dung như sau:

Các phương trình chuyển động trong cơ lượng tử có dạng như trong cơ cổ điển trong đó ta thay đại lượng bằng trị trung bình, cụ thể như sau:

+ Trong cơ cổ điển:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m} \quad \text{và} \quad \frac{dp_x}{dt} = F_x = -\frac{\partial U_x}{\partial x}. \tag{5.16}$$

+ Trong cơ lượng tử

$$\frac{d}{dt}\overline{x} = \frac{\overline{p}_x}{m} \quad \text{và} \quad \frac{d}{dt}\overline{p}_x = \overline{F}_x = -\overline{\frac{\partial U_x}{\partial x}}. \tag{5.17}$$

Bây giờ ta sẽ chứng minh định lý Erenfest.

Theo (5.1) ta có:

$$\frac{d}{dt}\overline{x} = \overline{\frac{dx}{dt}} = \langle\Psi|\frac{d\hat{x}}{dt}|\Psi\rangle \tag{5.18}$$

và

$$\frac{d}{dt}\overline{p}_x = \overline{\frac{dp_x}{dt}} = \langle\Psi|\frac{d\hat{p}_x}{dt}|\Psi\rangle. \quad (5.19)$$

Từ phương trình chuyển động Heisenberg, ta có dạng của $d\hat{x}/dt$ như sau:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \{\hat{H}, \hat{x}\} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{x}]. \quad (5.20)$$

Tính giao hoán tử $[\hat{H}, \hat{x}]$, với $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + \hat{U}(x)$ ta được $[\hat{H}, \hat{x}] = (-i\hbar)\hat{p}_x/m$, thay vào phương trình (5.20), ta được:

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m}. \quad (5.21)$$

Tương tự, ta tính được:

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial\hat{U}(x)}{\partial x}. \quad (5.22)$$

Thay biểu thức đạo hàm của toán tử $\hat{x}$ vào (5.18), ta được:

$$\frac{d}{dt}\overline{x} = \overline{\frac{dx}{dt}} = \langle\Psi|\frac{\hat{p}_x}{m}|\Psi\rangle = \frac{\bar{p}_x}{m}. \quad (5.23)$$

Tương tự, thay biểu thức đạo hàm của toán tử $\hat{p}_x$ vào (5.19), ta được:

$$\frac{d}{dt}\overline{p}_x = \overline{\frac{dp_x}{dt}} = \langle\Psi|\frac{d\hat{p}_x}{dt}|\Psi\rangle = -\langle\Psi|\frac{\partial\hat{U}(x)}{\partial x}|\Psi\rangle = -\overline{\frac{\partial U_x}{\partial x}} = \bar{F}_x. \quad (5.24)$$

Như vậy đạo hàm theo thời gian của trị trung bình của toạ độ bằng trị trung bình của xung lượng chia cho khối lượng của hạt. Đạo hàm theo thời gian của trị trung bình của xung lượng bằng trị trung bình của lực. Từ đó ta thấy rằng trong cơ học lượng tử, các trị trung bình của toạ độ và xung lượng của hạt cũng như lực tác dụng lên nó liên hệ với nhau bởi những phương trình tương tự như trong cơ học cổ điển. Nói cách khác đối với một hạt chuyển động, các trị trung bình của của các đại lượng trong cơ học lượng tử biến thiên như những giá trị thực của chúng trong cơ cổ điển. Định lý Erenfest đã được chứng minh.

Ví dụ 3.1:

Một hạt dao động điều hòa có điện tích $q > 0$ và khối lượng m, đặt trong một điện trường $E_0 \cos\omega t$.

a) Tính $d\bar{x}/dt$, $d\bar{p}/dt$, $d\bar{E}/dt$.

b) Giải phương trình cho $d\bar{x}/dt$, từ đó tìm $\bar{x}(t)$ khi biết $\bar{x}(0) = x_0$.

Lời giải

a) Theo phương trình Heisenberg, ta có:

$$\frac{d}{dt}\bar{x} = \frac{\bar{p}_x}{m}. \tag{5.25}$$

$$\frac{d}{dt}\bar{p}_x = \frac{i}{\hbar}\overline{[\hat{H}, \hat{p}_x]} = \frac{i}{\hbar}\overline{[\frac{1}{2}kx^2 + qE_0 x\cos\omega t, \hat{p}_x]} = -k\bar{x} - qE_0\cos\omega t. \tag{5.26}$$

$$\frac{d}{dt}\bar{H} = \frac{i}{\hbar}\overline{[\hat{H}, \hat{H}]} + \overline{\frac{\partial H}{\partial t}} = \overline{\frac{\partial H}{\partial t}} = -qE_0\omega\bar{x}\sin\omega t. \tag{5.27}$$

b) Đạo hàm theo thời gian biểu thức (5.25) và sử dụng (5.26), ta được:

$$\frac{d^2}{dt^2}\bar{x} = \frac{1}{m}\frac{d}{dt}\bar{p}_x = -\frac{k}{m}\bar{x} - \frac{qE_0}{m}\cos\omega t. \tag{5.28}$$

Phương trình này cho nghiệm là:

$$\bar{x}(t) = \bar{x}(0)\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) - \frac{qE_0}{m\omega}\sin\omega t + A, \tag{5.29}$$

với A là hằng số được xác định từ điều kiện đầu, Vì $\bar{x}(0) = x_0$, nên ta được $A = 0$, từ đó

$$\bar{x}(t) = x_0\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) - \frac{qE_0}{m\omega}\sin\omega t. \tag{5.30}$$

§ 4 TÍCH PHÂN CHUYỂN ĐỘNG VÀ CÁC ĐỊNH LUẬT BẢO TOÀN

4.1 TÍCH PHÂN CHUYỂN ĐỘNG

Tương tự như cơ học cổ điển, trong cơ học lượng tử đại lượng động lực A được gọi là tích phân chuyển động nếu $\frac{d}{dt}\overline{A} = 0$ hay $\frac{d\hat{A}}{dt} = 0$. Theo phương trình chuyển động Heisenberg ta thấy rằng A là một tích phân chuyển động khi:

$$\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}] = 0. \tag{5.31}$$

Để (5.31) được nghiệm đúng thì:

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0 \quad \text{và} \quad [\hat{H}, \hat{A}] = 0. \tag{5.32}$$

Như vậy, điều kiện để một đại lượng động lực là tích phân chuyển động là đại lượng động lực đó không phụ thuộc tường minh vào thời gian và toán tử tương ứng giao hoán với toán tử Hamilton. Ta sẽ chứng minh tính chất sau của tích phân chuyển động:

Nếu A là một tích phân chuyển động thì xác suất $w(a_n, t)$ ứng với một giá trị a_n nào đó A tại thời điểm t không phụ thuộc thời gian.

Thật vậy, vì hai toán tử $\hat{H}$ và $\hat{A}$ giao hoán với nhau nên chúng có chung hàm riêng. Gọi $\psi_n(\vec{r})$ là hàm riêng này, ta viết phương trình trị riêng của $\hat{H}$ và $\hat{A}$ như sau:

$$\hat{A}\psi_n(\vec{r}) = a_n\psi_n(\vec{r}), \quad \text{và} \quad \hat{H}\psi_n(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r}). \tag{5.33}$$

Khai triển một trạng thái bất kỳ $\Psi(\vec{r}, t)$ theo các hàm riêng $\psi_n(\vec{r})$, ta được:

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n c_n\psi_n(\vec{r})e^{-iE_nt/\hbar}, \tag{5.34}$$

hay:

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(\vec{r}), \quad \text{trong đó} \quad c_n(t) = c_n e^{-iE_nt/\hbar}. \tag{5.35}$$

Xác suất đo giá trị a_n là:

$$w(a_n) = |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 = \text{const}.$$

Điều đó có nghĩa là xác suất đo a_n không phụ thuộc thời gian.

4.2 TÍNH ĐỐI XỨNG CỦA KHÔNG GIAN, THỜI GIAN VÀ CÁC ĐỊNH LUẬT BẢO TOÀN

Cơ học lượng tử cũng có tất cả các định luật bảo toàn như cơ học cổ điển. Ngoài ra, nó còn bao gồm cả các định luật bảo toàn không có tiền lệ trong cơ

học cổ điển như: bảo toàn chẵn lẻ, bảo toàn tính đối xứng, bảo toàn spin... Khi một đại lượng động lực là tích phân chuyển động thì nó tuân theo định luật bảo toàn. Ta sẽ lần lượt xét các định luật sau:

a) Định luật bảo toàn xung lượng

Định luật này liên quan đến tính đồng nhất của không gian. Vì không gian là đồng nhất nên tính chất vật lý của một hệ kín không thay đổi qua một phép biến đổi tịnh tiến hệ coi như một tổng thể. Vì tính chất của hệ lượng tử được xác định bởi toán tử Hamilton của nó, nên tính đồng nhất của không gian thể hiện ở chỗ toán tử Hamilton bất biến đối với mọi phép biến đổi tịnh tiến. Nếu ta xét một phép biến đổi tịnh tiến một khoảng rất nhỏ $\delta\vec{r}$ và gọi $\hat{T}_{\delta\vec{r}}$ là toán tử tịnh tiến thì toán tử $\hat{H}$ sẽ giao hoán với toán tử $\hat{T}_{\delta\vec{r}}$, nghĩa là $[\hat{H}, \hat{T}_{\delta\vec{r}}] = 0$.

Dạng của toán tử $\hat{T}_{\delta\vec{r}}$ có thể được xác định như sau: Theo định nghĩa của toán tử tịnh tiến thì:

$$\hat{T}_{\delta\vec{r}}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}, ..., \vec{r}_N + \delta\vec{r}). \tag{5.36}$$

Khai triển hàm sóng ở vế phải của (5.36)

$$\psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}, ..., \vec{r}_N + \delta\vec{r}) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) + \delta\vec{r}\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial}{\partial\vec{r}_i}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) + ...$$

$$= (1 + \delta\vec{r}\sum_{i=1}^{N} \nabla_i)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N...).$$

Vậy:

$$\hat{T}_{\delta\vec{r}} = (1 + \delta\vec{r}\sum_{i=1}^{N} \nabla_i). \tag{5.37}$$

Thay dạng của toán tử $\hat{T}_{\delta\vec{r}}$ vào giao hoán tử $[\hat{H}, \hat{T}_{\delta\vec{r}}] = 0$, ta được:

$$[(1 + \delta\vec{r}\sum_{i} \nabla_i), \hat{H}] = 0 \Rightarrow [\hat{H}, \sum_{i} \nabla_i] = 0. \tag{5.38}$$

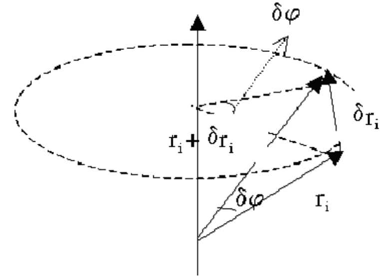
Vì toán tử xung lượng của hệ có dạng:

$$\hat{\vec{P}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{p}_i} = (\hbar/i)\sum_{i=1}^{N} \nabla_i, \tag{5.39}$$

nên hệ thức (5.38) trở thành $[\hat{H}, \hat{\vec{P}}] = 0$. Toán tử $\hat{\vec{P}}$ giao hoán với toán tử Hamilton nên xung lượng của hệ bảo toàn. Vậy ta kết luận rằng tính đồng nhất của không gian liên quan đến sự bảo toàn xung lượng.

b) Định luật bảo toàn mômen xung lượng

Định luật này liên quan đến tính đẳng hướng của không gian. Vì không gian là đẳng hướng nên tính chất vật lý của một hệ không đổi theo mọi phương. Về mặt vật lý, điều đó có nghĩa là Hamiltonian của hệ giao hoán với toán tử quay một góc nhỏ $\delta\varphi$. Gọi $\hat{L}_{\delta\varphi}$ là toán tử quay thì (Hình 5.1):



Hình 5.1: Sự quay một góc $\delta\varphi$ tương ứng với sự thay đổi vectơ $\vec{r}_i$ một đoạn $\delta\vec{r}_i$.

$$\hat{L}_{\delta\varphi}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}_2, ..., \vec{r}_N + \delta\vec{r}_N). \qquad (5.40)$$

Khai triển hàm sóng ở vế phải của (5.40)

$$\psi(\vec{r}_1 + \delta\vec{r}_1, \vec{r}_2 + \delta\vec{r}_2, ..., \vec{r}_N + \delta\vec{r}_N) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) + \sum_{i=1}^{N} \delta\vec{r}_i \frac{\partial}{\partial\vec{r}_i}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N) + ...$$

$$= (1 + \sum_{i=1}^{N} \delta\vec{r}_i \nabla_i)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_N ...).$$

Vì: $\delta\vec{r}_i = \delta\vec{\varphi} \wedge \vec{r}_i$, nên

$$\hat{L}_{\delta\varphi} = 1 + \sum_{i=1}^{N}(\delta\vec{\varphi} \wedge \vec{r}_i)\nabla_i) = 1 + \sum_{i=1}^{N} \delta\vec{\varphi}(\vec{r}_i \wedge \nabla_i). \qquad (5.41)$$

Do $[\hat{H}, \hat{L}_{\delta\varphi}] = 0$, nên

$$[\hat{H}, \sum_{i=1}^{N}(\vec{r}_i \wedge \nabla_i)] = 0.$$

Vì toán tử mômen xung lượng của hệ có dạng:

$$\hat{\vec{L}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{\vec{\ell}}_i = \sum_{i=1}^{N} (\vec{r}_i \wedge \nabla_i), \tag{5.42}$$

nên $[\hat{H}, \hat{\vec{L}}] = 0$. Toán tử $\hat{\vec{L}}$ giao hoán với toán tử Hamilton nên mômen xung lượng của hệ bảo toàn. Từ đó ta kết luận rằng tính đẳng hướng của không gian liên quan đến sự bảo toàn mômen xung lượng.

c) Định luật bảo toàn năng lượng

Định luật này liên quan đến tính đồng nhất của thời gian. Điều này có nghĩa là các định luật chuyển động của hệ không phụ thuộc vào việc chọn gốc thời gian. Ta gọi $\hat{V}_{\delta t}$ là toán tử tịnh tiến thời gian một khoảng bé δt và được xác định bởi hệ thức:

$$\hat{V}_{\delta t}\Psi(x,t) = \Psi(x, t+\delta t).$$

Thực hiện khai triển:

$$\Psi(x, t+\delta t) = (1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t})\Psi(x,t). \tag{5.43}$$

Như vậy, toán tử $\hat{V}_{\delta t}$ có dạng:

$$\hat{V}_{\delta t} = 1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}. \tag{5.44}$$

Vì toán tử $\hat{V}_{\delta t}$ phải giao hoán với toán tử Hamilton, nên ta tìm được $\partial \hat{H}/\partial t = 0$. Mặt khác vì toán tử năng lượng giao hoán với chính nó nên ta suy ra $d\hat{H}/dt = 0$. Như vậy năng lượng được bảo toàn.

d) Định luật bảo toàn chẵn lẻ

Định luật bảo toàn chẵn lẻ liên quan đến tính nghịch đảo của không gian. Đây là phép biến đổi làm thay đổi dấu của toạ độ không gian của hạt:

$$x \to -x; \quad y \to -y; \quad z \to -z.$$

Như vậy trong phép biến đổi không gian thì hệ toạ độ phải biến thành hệ tọa độ trái. Nếu gọi toán tử nghịch đảo là $\hat{I}$ thì ta có:

$$\hat{I}\psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z). \tag{5.45}$$

Toán tử Hamilton của một hệ kín bất kỳ là bất biến đối với phép biến đổi nghịch đảo. Tính bất biến này cũng đúng cho một hệ ở trong trường ngoài đối xứng xuyên tâm, nếu tâm đối xứng là tâm của trường. Như vậy ta có: $[\hat{H}, \hat{I}] = 0$.

Ta xác định trị riêng của toán tử nghịch đảo. Muốn vậy, ta hãy tác dụng toán tử $\hat{I}$ lên cả 2 vế của phương trình (5.45):

$$\hat{I}^2\psi(x, y, z) = \hat{I}\psi(-x, -y, -z) = \psi(x, y, z).$$

Theo phương trình trị riêng:

$$\hat{I}^2\psi(x, y, z) = I^2\psi(x, y, z)$$

ta thấy toán tử $\hat{I}$ có trị riêng là $I = \pm 1$. Như vậy khi tác dụng toán tử $\hat{I}$ lên hàm sóng thì ta có thể có hai trường hợp:

$$\hat{I}\psi(x, y, z) = +\psi(-x, -y, -z),$$

hoặc

$$\hat{I}\psi(x, y, z) = -\psi(-x, -y, -z).$$

Ta gọi hàm sóng trong trường hợp đầu là hàm chẵn và trường hợp sau là hàm lẻ. Từ hệ thức $[\hat{H}, \hat{I}] = 0$, ta đi đến kết luận là tính chẵn lẻ của hàm sóng là một tích phân chuyển động. Định luật bảo toàn chẵn lẻ có thể phát biểu như sau:

Khi một hệ kín có số chẵn lẻ xác định thì số chẵn lẻ đó không đổi theo thời gian.

§ 5 TÓM TẮT CHƯƠNG 5

- Sự thay đổi của đại lượng động lực theo thời gian được biểu diễn bởi sự thay đổi trị trung bình trong phép đo các đại lượng đó theo thời gian.
- Đạo hàm của trị trung bình theo thời gian được biểu diễn qua đạo hàm của toán tử theo thời gian, được mô tả bởi phương trình Heisenberg.

- Các định luật bảo toàn trong cơ lượng tử cũng tương tự như trong cơ cổ điển, nhưng được giải thích theo quan điểm lượng tử với vai trò của toán tử Hamilton và các tính chất cơ bản của không gian và thời gian.
- Ngoài các đại lượng động lực được bảo toàn đã biết như trong cơ cổ điển, trong cơ lượng tử còn có các định luật bảo toàn mới, như định luật bảo toàn chẵn lẻ, bảo toàn mômen toàn phần...

§ 6 BÀI TẬP CHƯƠNG 5

1. Chứng minh rằng đạo hàm theo thời gian của tổng và tích hai toán tử cũng tuân theo quy luật giống như đạo hàm của tổng và tích hai hàm số thông thường.
2. Hạt chuyển động trong trường thế U(x), Hãy chứng minh các hệ thức sau:

   a) $\frac{d}{dt}(\hat{x^2}) = (\hat{x}\hat{p_x} + \hat{p_x}\hat{x})/m$

   b) $\frac{d}{dt}(\hat{x}\hat{p_x}) = (\hat{P_x^2})/m + \hat{x}\frac{\partial U(x)}{\partial x}$

   c) $\frac{d}{dt}(\hat{p_x^2}) = -(\hat{p_x}\frac{\partial U(x)}{\partial x} + \frac{\partial U(x)}{\partial x}\hat{p_x})$.
3. Chứng tỏ rằng trị trung bình của xung lượng của hạt ở trạng thái dừng thì bằng không.
4. Chứng minh rằng trị trung bình của đạo hàm theo thời gian của một đại lượng vật lý không phụ thuộc tường minh vào thời gian trong trạng thái dừng thuộc phổ gián đoạn thì bằng 0.
5. Đối với hạt chuyển động tự do một chiều theo trục x, các đại lượng nào sau đây là các tích phân chuyển động: năng lượng, xung lượng, hình chiếu momen xung lượng lên trục x (L_x) và momen toàn phần L^2.
6. Toán tử Hamilton của hạt mang điện chuyển động trong điện từ trường

có dạng:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + U(\vec{r}),$$

trong đó $\vec{A}$ là thế vectơ, m là khối lượng của hạt.

(a) Tìm toán tử vận tốc của hạt.

(b) Thiết lập các hệ thức giao hoán giữa các toán tử thành phần vận tốc.

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. Dùng hệ thức đạo hàm của tổng và tích hai toán tử:

$$\frac{d}{dt}\hat{A} + \hat{B} = \frac{\partial}{\partial t}(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A} + \hat{B}].$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}\hat{B} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\hat{B} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}\hat{B}].$$

Suy ra hệ thức cần chứng minh là:

$$\frac{d}{dt}(\hat{A} + \hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt}$$

$$\frac{d}{dt}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{d\hat{A}}{dt}\hat{B} + \hat{A}\frac{d\hat{B}}{dt}$$

2. Sử dụng quy tắc đạo hàm của tích hai toán tử như bài 1), sau đó áp dụng phương trình chuyển động Heisenberg đối với $\frac{d\hat{x}}{dt}$ và $\frac{d\hat{p_x}}{dt}$

3. Sử dụng công thức tính trị trung bình $\overline{p}_x = \langle\psi(x)|\hat{p_x}\psi(x)\rangle$.
Vì: $\hat{p}_x = m\frac{(d\hat{x})}{dt} = (mi/\hbar)[\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}]$, thay vào biểu thức của $\overline{p}_x$ rồi áp dụng tính chất Hermite của toán tử $\hat{H}$, ta được:

$$\overline{p_x} = (imE/\hbar)\{\langle\psi|\hat{x}\psi\rangle - \langle\psi|\hat{x}\psi\rangle\} = 0$$

4. Gọi A là đại lượng vật lý đang xét, ta có biểu thức của trị trung bình của đạo hàm của A:

$$\overline{\frac{dA}{dt}} = \left\langle\psi_n|\frac{d\hat{A}}{dt}\psi_n\right\rangle = (i/\hbar)\left\langle\psi_n|[\hat{H}, \hat{A}]\psi_n\right\rangle.$$

Khai triển móc $[\hat{H}, \hat{A}]$, áp dụng tính chất Hermite của toán tử $\hat{H}$ rồi áp dụng phương trình trị riêng của toán tử $\hat{H}$: $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, ta được:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{iE_n}{\hbar}\Big(\langle\psi_n|\hat{A}\psi_n\rangle - \langle\psi_n|\hat{A}\psi_n\rangle\Big) = 0.$$

5. Vì các đại lượng đã cho không phụ thuộc tường minh vào thời gian, nên để chứng minh chúng là các tích phân chuyển động ta chỉ cần chứng minh toán tử tương ứng với chúng giao hoán với toán tử Hamilton, nghĩa là: $[\hat{H}, \hat{p_x}] = 0; [\hat{H}, \hat{L_z}]; [\hat{H}, \hat{L^2}] = 0$, trong đó $\hat{H} = \hat{P}^2/2m$.

   a) Vì $[\hat{H}, \hat{p_x}] = 0$ nên năng lượng là 1 tích phân chuyển động.

   b) $[\hat{H}, \hat{p_x}] = \frac{1}{2m}[\hat{p_x^2}, \hat{p_x}] = 0 \Rightarrow$ xung lượng là 1 tích phân chuyển động.

$$\begin{aligned} c)\ [\hat{H}, \hat{L_x}] &= \frac{1}{2m}[\hat{p_x^2}, (\hat{y}\hat{p_z} - \hat{z}\hat{p_y}] = \frac{1}{2m}\Big([\hat{p_x^2}, (\hat{y}\hat{p_z} - \hat{z}\hat{p_y})]\Big) \\ &= \frac{1}{2m}\Big([\hat{p_x^2}, \hat{y}\hat{p_z}] - [\hat{p_x^2}, \hat{z}\hat{p_y}]\Big). \end{aligned} \tag{5.46}$$

   Sử dụng các tính chất của giao hoán tử và các công thức:

$$[\hat{P_j}, \hat{x_k}] = -i\hbar\delta_{jk}; [\hat{P_j}, \hat{P_k}] = 0$$

   , ta suy ra L_x là 1 tích phân chuyển động.

$$d)\ [\hat{H}, \hat{L^2}] = \frac{1}{2m}[\hat{p_x^2}, (\hat{L_x^2} + \hat{L_y^2} - \hat{L_z^2})] = \frac{1}{2m}\Big([\hat{p_x^2}, \hat{L_x^2}] + [\hat{p_x^2}, \hat{L_y^2}] + [\hat{p_x^2}, \hat{L_z^2}]\Big).$$

   Thực hiện phép tính các giao hoán tử trên, ta được:

$$[\hat{p_x^2}, \hat{L_x^2}] = 0; \quad [\hat{p_x^2}, \hat{L_y^2}] = 0; \quad [\hat{p_x^2}, \hat{L_z^2}] \neq 0.$$

   Vì vậy L^2 không phải là 1 tích phân chuyển động.

6. Toán tử Hamilton của hạt mang điện chuyển động trong điện từ trường có dạng:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + U(\vec{r})$$

(a) Toán tử vận tốc được tính theo công thức: $\hat{\vec{v}} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \vec{r}]$, thay toán tử $\hat{H}$ vào và tính ra, ta được:

$$\hat{\vec{v}} = \frac{1}{m}\left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)$$

b) Tính hệ thức giao hoán giữa các thành phần vận tốc ta được:

$$[v_x, v_y] = \frac{i\hbar e}{m^2 c} rot_z \vec{A};\ [v_y, v_z] = \frac{i\hbar e}{m^2 c} rot_x \vec{A};\ [v_z, v_x] = \frac{i\hbar e}{m^2 c} rot_y \vec{A}.$$

Chương 6

Chuyển động của hạt trong trường xuyên tâm

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là giải phương trình Schrodingercủa hạt trong trường xuyên tâm với hệ tọa độ sử dụng là hệ tọa độ cầu. Bài toán thực tế ứng với trường hợp này là bài toán nguyên tử Hydro và các ion tương tự. Các tính chất của năng lượng và hàm sóng của electron trong nguyên tử Hydro sẽ được khảo sát một cách chi tiết.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ nắm được cách giải phương trình trị riêng của toán tử hình chiếu mô-men xung lượng lên trục z, của toán tử mô-men toàn phần và của toán tử năng lượng. Sinh viên cũng sẽ giải được các bài toán liên quan đến xung lượng, năng lượng và hàm sóng của electron trong nguyên tử Hydro.

§ 1 CÁC ĐẶC ĐIỂM CỦA CHUYỂN ĐỘNG CỦA HẠT TRONG TRƯỜNG XUYÊN TÂM

1.1 KHÁI NIỆM TRƯỜNG XUYÊN TÂM

Một trường lực được gọi là đối xứng xuyên tâm khi lực tác dụng tại một điểm trong trường thỏa mãn các điều kiện sau:

(1) Đi qua một điểm cố định gọi là tâm của trường.

(2) Thế năng ứng với lực chỉ phụ thuộc vào khoảng cách từ hạt đến tâm trường.

Khi nghiên cứu chuyển động của hạt trong trường xuyên tâm có một đại lượng động lực đóng vai trò rất quan trọng đó là mô-men xung lượng. Trước khi khảo sát chi tiết ta cần nghiên cứu cụ thể toán tử momen xung lượng.

1.2 TOÁN TỬ MÔ-MEN XUNG LƯỢNG

Để thuận tiện cho việc khảo sát ta dùng toạ độ cầu. Ta quan tâm đến hai thành phần cơ bản của toán tử mô-men xung lượng hay còn gọi là mô-men góc (angular momentum), đó là toán tử hình chiếu mô-men $\hat{L}_z$ và toán tử mô-men toàn phần $\hat{L}^2$.

Trong Chương II, ta đã biết toán tử $\hat{L}_z$ có dạng $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$ với trị riêng $L_z = m\hbar$, tương ứng với hàm riêng $\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$, trong đó $m = 0, \pm1, \pm2,...$

Bây giờ ta tìm hàm riêng và trị riêng của toán tử bình phương mô-men xung lượng. Trong toạ độ cầu dạng của toán tử này là:

$$\hat{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\theta\phi},$$

với $\Delta_{\theta\phi}$ là phần góc của toán tử Laplace và có dạng:

$$\Delta_{\theta\phi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{6.1}$$

Ta dễ dàng chứng minh được $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$, nghĩa là các toán tử $\hat{L}_z$ và $\hat{L}^2$ giao hoán với nhau, vì vậy chúng có chung một hàm riêng chung, ta gọi hàm này là ψ_m.

a) Trị riêng của toán tử L^2:

Trước hết, ta đưa ra hai toán tử bậc thang (ladder operator) có dạng sau:

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad \text{và} \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \tag{6.2}$$

Ta dễ dàng chứng minh được các hệ thức dưới đây:

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z, \tag{6.3}$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm, \tag{6.4}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_\pm\hat{L}_\mp + \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z. \tag{6.5}$$

Tác dụng hệ thức toán tử $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$ lên hàm ψ_m, ta được:

$$(\hat{L}_z\hat{L}_\pm)\psi_m = (\hat{L}_\pm\hat{L}_z)\psi_m \pm \hbar\hat{L}_\pm\psi_m \Rightarrow \hat{L}_z(\hat{L}_\pm\psi_m) = \hat{L}_\pm(\hat{L}_z\psi_m) \pm \hbar(\hat{L}_\pm\psi_m).$$

Từ phương trình trị riêng $\hat{L}_z\psi_m = m\hbar\psi_m$, ta tính được:

$$\hat{L}_z(\hat{L}_\pm\psi_m) = (m \pm 1)\hbar\hat{L}_\pm\psi_m. \tag{6.6}$$

Trong phương trình (6.6), số hạng $\hat{L}_\pm\psi_m$ là hàm riêng của toán tử L_z ứng với trị riêng $(m \pm 1)\hbar$. Từ đó ta thấy toán tử $\hat{L}_\pm$ tác dụng lên hàm ψ_m làm cho trị riêng của toán tử $\hat{L}_z$ thay đổi một đơn vị của $\hbar$: $m\hbar \to (m \pm 1)\hbar$. Như vậy ta có thể viết:

$$\hat{L}_+\psi_m = \text{const}\psi_{m+1} \quad \text{và} \quad \hat{L}_-\psi_m = \text{const}\psi_{m-1}.$$

Toán tử $\hat{L}_+$ vì thế được gọi là toán tử nâng (raising operator), trong lúc đó toán tử $\hat{L}_-$ được gọi là toán tử hạ (lowering operator). Vì trị riêng của một toán tử là hữu hạn nên giá trị m phải hữu hạn. Giả sử ta đặt $(m)_{max} = \ell$, thì $\hat{L}_+\psi_\ell = 0$.

Bây giờ ta cho tác dụng của toán tử L^2 lên hàm ψ_ℓ

$$\hat{L}^2\psi_\ell = \hat{L}_-\hat{L}_+\psi_\ell + \hat{L}_z^2\psi_\ell + \hbar\hat{L}_z\psi_\ell = (\hbar\ell)^2\psi_\ell + \hbar^2\ell\psi_\ell = \hbar^2\ell(\ell+1)\psi_\ell. \tag{6.7}$$

Phương trình (6.7) chính là phương trình trị riêng của toán tử $\hat{L}^2$ ứng với hàm riêng ψ_ℓ. Như vậy, trị riêng của toán tử $\hat{L}^2$ là

$$L^2 = \hbar^2\ell(\ell+1), \quad \text{với} \quad \ell = 0, 1, 2... \tag{6.8}$$

Ta thấy rằng, ứng với 1 giá trị của ℓ thì có nhiều giá trị của m nhưng giá trị cực đại của m thì bằng ℓ, như vậy $m = 0, \pm1, \pm2, ... \pm \ell$, tất cả có $(2\ell + 1)$ giá trị.

Ví dụ 1.2.1:

Toán tử bậc thang $\hat{L}_\pm$ tác dụng lên hàm f_ℓ^m cho kết quả sau:

$$\hat{L}_\pm f_\ell^m = A_\ell^m f_\ell^{m\pm1}.$$

Tìm A_l^m từ điều kiện chuẩn hóa.

Lời giải:

Trước hết ta chứng minh $(\hat{L}_\pm)^\dagger = \hat{L}_\mp$.

Ta tính tích vô hướng:

$$\begin{aligned} \langle f|\hat{L}_\pm g\rangle &= \langle f|\hat{L}_x g\rangle \pm i\langle f|\hat{L}_y g\rangle = \langle \hat{L}_x f|g\rangle \pm i\langle \hat{L}_y f|g\rangle \\ &= \langle (\hat{L}_x \mp i\hat{L}_y) f|g\rangle = \langle L_\mp f|g\rangle, \text{ , vì vậy } (\hat{L}_\pm)^\dagger = \hat{L}_\mp. \end{aligned}$$

Điều kiện chuẩn hóa:

$$\langle \hat{L}_\pm f_\ell^m|\hat{L}_\pm f_\ell^m\rangle = \langle A_\ell^m f_\ell^{m\pm1}|A_\ell^m f_\ell^{m\pm1}\rangle = |A_\ell^m|^2\langle f_\ell^{m\pm1}|f_\ell^{m\pm1}\rangle = |A_\ell^m|^2.$$

Vì $(\hat{L}_\pm)^\dagger = \hat{L}_\mp$ nên điều kiện chuẩn hóa có thể viết lại như sau:

$$\langle \hat{L}_\pm f_\ell^m|\hat{L}_\pm f_\ell^m\rangle = \langle f_\ell^m|\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm f_\ell^m\rangle. \tag{6.9}$$

Sử dụng hệ thức (6.5) ta được: $\hat{L}_\pm \hat{L}_\mp = \hat{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z$ Thay vào phương trình (6.9), ta được:

$$\begin{aligned} \langle f_\ell^m|\hat{L}_\mp \hat{L}_\pm f_\ell^m\rangle &= \langle f_\ell^m|(\hat{L}^2 - L_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z) f_\ell^m\rangle \\ &= \langle f_\ell^m|[\hbar^2 \ell(\ell+1) - \hbar^2 m^2 \mp \hbar^2 m] f_\ell^m\rangle \\ &= \hbar^2[\ell(\ell+1) - m(m\pm1]\langle f_\ell^m|f_\ell^m\rangle = \hbar^2[\ell(\ell+1) - m(m\pm1)]. \end{aligned} \tag{6.10}$$

So sánh (6.9) và (6.10), ta được: $A_\ell^m = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)}$.

b) Hàm riêng của toán tử $\hat{L}^2$

Ta đã biết toán tử $\hat{L}_z$, toán tử $\hat{L}^2$ giao hoán với nhau, vì vậy chúng có hàm riêng chung. Đây là một hàm điều hòa cầu có dạng phụ thuộc vào góc θ và góc

ϕ. Ta ký hiệu hàm này là $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$. Phương trình trị riêng của toán tử $\hat{L}^2$ và $\hat{L}_z$ là:

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\phi), \tag{6.11}$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell m}(\theta\phi) = m\hbar Y_{\ell m}(\theta\phi). \tag{6.12}$$

Vì $\hat{L}_z$ chỉ phụ thuộc vào góc ϕ nên hàm riêng $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ bằng tích của hai hàm phụ thuộc vào 2 biến θ và ϕ riêng biệt:

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\phi). \tag{6.13}$$

Để tìm dạng cụ thể của $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ ta tìm dạng của $\Theta_{\ell m}(\theta)$ vì dạng của $\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ đã biết.
Thay dạng của $\hat{L}^2$ vào (6.11), ta được:

$$-\hbar^2\Delta_{\theta,\phi}Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\phi),$$

hay

$$\Delta_{\theta,\phi}Y_{\ell m}(\theta,\phi) + \ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\phi) = 0.$$

Thay dạng của phần góc của toán tử Laplace vào phương trình trên, ta được

$$\frac{\Phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\Big) + \frac{\Theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} + \ell(\ell+1)\Theta\Phi = 0. \tag{6.14}$$

Vì $\Phi = (1/\sqrt{2\pi})e^{im\phi}$ nên $\Phi" = -m^2\Phi$. Thay vào (6.14) ta được:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\Big) + \Big(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\Big)\Theta(\theta) = 0. \tag{6.15}$$

Để giải phương trình (6.15) ta dùng phương pháp đổi biến số:
Đặt $x = \cos\theta$, lúc đó $\frac{\partial}{\partial\theta} = -\sin\theta\frac{\partial}{\partial x}$, phương trình (6.15) trở thành:

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \Big[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\Big]\Theta = 0. \tag{6.16}$$

So sánh với phương trình cho đa thức Legendre liên kết:

$$(1-x^2)\frac{d^2y(x)}{dx^2} - 2x\frac{dy(x)}{dx} + \Big[\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\Big]y(x) = 0. \tag{6.17}$$

Ta thấy $\Theta(\theta)$ có dạng là một đa thức Legendre liên kết:

$$\Theta(\theta) = P_\ell^m(\cos\theta) = (1-\cos^2\theta)^{|m|/2}\frac{d^|m|\big(P_\ell(\cos\theta)\big)}{d(\cos\theta)^|m|}, \tag{6.18}$$

trong đó $P_\ell(\cos\theta)$ là đa thức Legendre được xác định bởi công thức Rodrigues

$$P_\ell(\cos\theta) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell. \tag{6.19}$$

Vậy:

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = C_{\ell m}P_m^\ell(\cos\theta)e^{im\phi}. \tag{6.20}$$

Hằng số $C_{\ell m}$ trong (6.20) được xác định từ điều kiện trực chuẩn của hàm $Y_{\ell m}$:

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}(Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi))^* Y_\ell^m(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi = \delta_{\ell',\ell}\delta_{m',m}. \tag{6.21}$$

Dùng điều kiện trực giao của đa thức Legendre liên kết:

$$\int_0^\pi P_{\ell'}^m(\cos\theta)P_\ell^m(\cos\theta)\sin\theta d\phi = \frac{2}{(2\ell+1)}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}\delta_{\ell,\ell'}. \tag{6.22}$$

ta tìm được

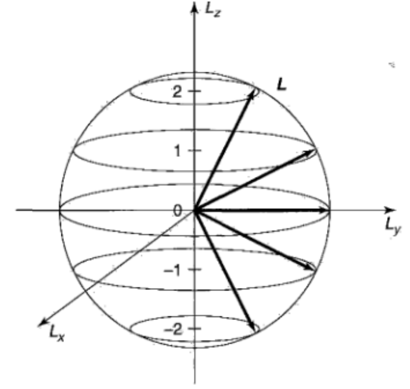
$$C_{\ell m} = (-1)^m\sqrt{\left(\frac{(2\ell+1)}{2}\right)\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \qquad (m\geq 0). \tag{6.23}$$

Từ đó ta được dạng tổng quát của hàm cầu chuẩn hóa với các giá trị của ℓ, m xác định:

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = (-1)^m\sqrt{\left(\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\right)\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\phi} \qquad (m\geq 0). \tag{6.24}$$

Ta đã tìm được trị riêng của toán tử $\hat{L}_z$ phụ thuộc vào lượng tử m và trị riêng của toán tử $\hat{L}^2$ phụ thuộc vào lượng tử ℓ, trong đó $\ell = 0, 1, 2,$...và $\ell \geq m$, còn $m = 0, \pm1, \pm2, ... \pm \ell$. Như vậy với một giá trị của ℓ thì có $2\ell+1$ giá trị của m. Về mặt vật lý, điều này có nghĩa là ứng với một giá trị xác định của bình phương mô-men xung lượng thì hình chiếu của nó lên trục z có $2\ell+1$ giá trị. Vì trục z được định hướng một cách bất kỳ nên với một giá trị của L^2 thì hình chiếu của mô-men xung lượng lên trục x hoặc trục y cũng có $2\ell+1$ giá trị. Khi $\ell = 0$, thì $L^2 = 0$, và $L_x = L_y = L_z = 0$.

Đó cũng là trạng thái duy nhất mà các hình chiếu mô-men đồng thời xác định và hàm riêng chung của của 3 toán tử hình chiếu mô-men góc lên ba trục x, y, z là một hằng số $Y_{00} = (4\pi)^{-1/2}$. Hình 6.1 minh họa quan hệ giữa độ lớn mô-men xung L và hình chiếu của nó lên trục z khi $\ell = 2$.



Hình 6.1: Biểu diễn sơ đồ vectơ mô-men xung lượng $\vec{L}$ và hình chiếu L_z đối với trường hợp $\ell = 2, m = 0, \pm 1, \pm 2$

Bảng sau đây là một vài dạng của hàm cầu với $\ell = 0, 1, 2$:

Dạng Hàm cầu trong hệ tọa độ cầu	Dạng Hàm cầu trong hệ tọa độ Descartes
$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$	$Y_{0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$	$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$
$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\ e^{\pm i\phi}$	$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x \pm iy}{r}$
$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$	$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{3z^2 - r^2}{r^2}$
$Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$	$Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x \pm iy)z}{r^2}$
$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\ e^{\pm 2i\phi}$	$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\frac{x^2 - y^2 \pm 2ixy}{r^2}$

Ví dụ 1.2.2:

Hạt chuyển động với hàm sóng

$$\psi(x,y,z) = N(x+y+z)e^{-[(x^2+y^2+z^2)/\alpha^2]}, \qquad (6.25)$$

trong đó N là hệ số chuẩn hóa, α là một thông số. Tìm xác suất để phép đo các giá trị của L^2 và L_z cho kết quả:

(a) $L^2 = 2\hbar^2,\ L_z = 0$;

(b) $L^2 = 2\hbar^2,\ L_z = \hbar$;

(c) $L^2 = 2\hbar^2,\ L_z = -\hbar$.

Lời giải:

Từ hệ thức liên hệ giữa tọa độ Descartes và tọa độ cầu

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \quad y = r\sin\theta\sin\phi,$$
$$z = r\cos\phi, \quad r^2 = x^2+y^2+z^2,$$

ta viết lại dạng của hàm sóng (6.25) như sau:

$$\psi(r,\theta,\phi) = N[\sin\theta(\cos\phi+\sin\phi)+\cos\theta]re^{-r^2/\alpha^2}.$$

Đặt $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)T(\theta,\phi)$, trong đó

$$R(r) = Nre^{-r^2/\alpha^2},$$
$$T(\theta,\phi) = \sum_{\ell,m} a_{\ell m}Y_\ell^m(\theta,\phi) = \sin\theta\cos\phi+\sin\theta\sin\phi+\cos\theta.$$

Hệ số $a_{\ell m}$ được xác định từ biểu thức:

$$a_{\ell m} =< \ell m|T(\theta,\phi >) = \int (Y_\ell^m)^* T(\theta,\phi)d\theta d\phi.$$

Sử dụng tính chất của hàm cầu, ta có thể chứng minh được:

$$\begin{aligned} T(\theta,\phi) &= \sqrt{\frac{8\pi}{3}}[\frac{1}{2}(Y_1^{-1}-Y_1^1)-\frac{1}{2i}(Y_1^{-1}+Y_1^1)]+\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0 \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}}[(1+i)Y_1^{-1}-(1-i)Y_1^1+\sqrt{2}Y_1^0]. \end{aligned}$$

Để tính xác suất ta phải chuẩn hóa hàm $T(\theta,\phi)$. Ký hiệu hàm chuẩn hóa là $T\,'(\theta,\phi)=\beta T(\theta,\phi)$, ta được

$$\beta^2\int T^*Td\theta d\phi=\beta^2\frac{2\pi}{3}(2+2+2)=4\pi\beta^2=1\Rightarrow\beta=1/\sqrt{4\pi}.$$

Các giá trị xác suất được tính như sau:

(a) Đối với $L^2=2\hbar^2$ và $L_z=0$, nghĩa là $\ell=1,\ m=0$, ta có:

$$w_{1,0}=|<1,0|T\,'>|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{2}\right|^2=\frac{1}{3}. \tag{6.26}$$

(b) Đối với $L^2=2\hbar^2$ và $L_z=\hbar$, nghĩa là $\ell=1,\ m=1$, ta có:

$$w_{1,1}=|<1,1|T\,'>|^2=\left|-\frac{1-i}{\sqrt{6}}\right|^2=\frac{1}{3}. \tag{6.27}$$

(c) Đối với $L^2=2\hbar^2$ và $L_z=-\hbar$, nghĩa là $\ell=1,\ m=-1$, ta có:

$$w_{1,-1}=|<1,-1|T\,'>|^2=\left|\frac{1+i}{\sqrt{6}}\right|^2=\frac{1}{3}.$$

1.3 CÁC ĐẶC ĐIỂM CỦA HẠT CHUYỂN ĐỘNG CỦA HẠT TRONG TRƯỜNG XUYÊN TÂM

Ta nghiên cứu các đặc điểm chuyển động của hạt khối lượng μ trong trường xuyên tâm với thế năng $U=U(r)$. Hamitonian của hạt ở trạng thái dừng là:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U(r). \tag{6.28}$$

Trong (6.28) để khỏi nhầm với số lượng tử m ta ký hiệu khối lượng của hạt là μ. Dạng của toán tử Laplace trong hệ toạ độ cầu là:

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\left[r^2\frac{\partial}{\partial r}\big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\big)+\Delta_{\theta,\phi}\right]. \tag{6.29}$$

Thay vào biểu thức của Hamiltonian trong (6.28), ta được:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\big)+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}+U(r). \tag{6.30}$$

Từ dạng của toán tử Hamiltion trong (6.30), ta dễ dàng chứng minh được rằng toán tử $\hat{H}$ giao hoán với toán tử $\hat{L}_z$ và $\hat{L}^2$. Như vậy, các hệ mô tả bởi Hamiltonian dạng (6.30) có thể ở trong các trạng thái dừng có giá trị xác định của năng lượng, bình phương mô-men xung lượng và hình chiếu của mô-men xung lượng. Mặt khác, theo Chương 5 ta thấy rằng mô-men xung lượng (L^2 và L_z) của hạt trong trường xuyên tâm là các tích phân chuyển động. Đây chính là hệ quả của tính đối xứng cầu của trường xuyên tâm.

§ 2 PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER CỦA HẠT TRONG TRƯỜNG XUYÊN TÂM

2.1 PHƯƠNG TRÌNH BÁN KÍNH VÀ PHƯƠNG TRÌNH GÓC

Phương trình Schrodinger của hạt ở trạng thái dừng là:

$$\Delta\psi(r,\theta,\phi) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi(r,\theta,\phi) = 0. \tag{6.31}$$

Thay (6.29) vào (6.31) ta được phương trình:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\psi(r,\theta,\phi)\big) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi}\psi(r,\theta,\phi) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]\psi(r,\theta,\phi) = 0. \tag{6.32}$$

Do biến số r độc lập với hai biến số θ, ϕ nên hàm sóng $\psi(r,\theta,\phi)$ có thể viết dưới dạng:

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi), \tag{6.33}$$

trong đó hàm $R(r)$ chỉ phụ thuộc bán kính nên được gọi là hàm bán kính hoặc hàm xuyên tâm, còn hàm $Y(\theta,\phi)$ phụ thuộc vào hai góc θ và ϕ nên được gọi là hàm góc. Thay dạng của hàm sóng trong (6.33) vào phương trình (6.32) ta được:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r))}{\partial r}\right)Y(\theta,\phi) + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi}Y(\theta,\phi)R(r) + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U(r)]R(r)Y(\theta,\phi) = 0. \tag{6.34}$$

Chia hai vế của (6.34) cho $R(r)Y(\theta,\phi)$, ta được

$$\frac{1}{R(r)}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r))}{\partial r}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E-U(r)]R(r)\right]=-\frac{\Delta_{\theta,\phi}Y(\theta,\phi)}{Y(\theta,\phi)}=\alpha=\text{const.} \tag{6.35}$$

Từ đó ta được hai phương trình:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E-U(r)]R(r)=\alpha R(r). \tag{6.36}$$

$$-\Delta_{\theta,\phi}Y(\theta,\phi)=\alpha Y(\theta,\phi). \tag{6.37}$$

Phương trình (6.36) được gọi là phương trình bán kính, còn phương trình (6.37) được gọi là phương trình góc. Ta để ý rằng nếu nhân phương trình (6.37) cho $\hbar^2$ thì nó chính là phương trình trị riêng của toán tử $\hat{L}^2$, từ đó ta suy ra $\alpha=\ell(\ell+1)$. Thay giá trị này vào phương trình bán kính ta được:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}[E-U(r)-\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}]R(r)=0. \tag{6.38}$$

Như vậy, để giải phương trình Schrodinger của hạt trong trường xuyên tâm với ba biến số (r,θ,ϕ), ta chỉ cần giải phương trình bán kính (6.38) với một biến r duy nhất.

Phương trình bán kính phụ thuộc vào dạng của thế năng $U(r)$ và chỉ giải được khi biết dạng cụ thể của nó. Phương trình này chứa số lượng tử quỹ đạo ℓ, mà không chứa số lượng tử từ m. Như vậy, nghiệm của phương trình (6.38) là năng lượng E và hàm bán kính $R(r)$ chỉ phụ thuộc vào ℓ mà không phụ thuộc m.

2.2 KHẢO SÁT PHƯƠNG TRÌNH BÁN KÍNH

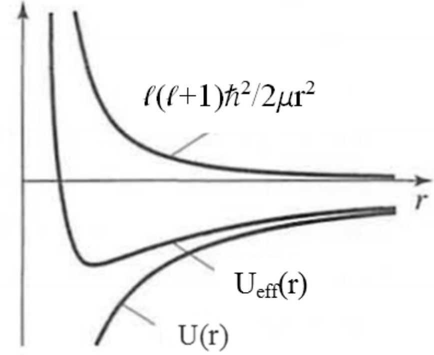
Để giải phương trình bán kính (6.38), ta đặt: $R(r)=u(r)/r$. Lúc đó phương trình này trở thành:

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-U(r)-\frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right]u(r)=0. \tag{6.39}$$

Nếu đặt

$$U_{\text{eff}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} \tag{6.40}$$

là thế năng hiệu dụng thì phương trình (6.39) trở thành:



Hình 6.2: Thế hiệu dụng $U_{eff} = U(r) + \hbar^2\ell(\ell+1)/(2\mu r^2)$. $U(r)$ là thế hấp dẫn xuyên tâm, $\hbar^2\ell(\ell+1)/(2\mu r^2)$ là thế ly tâm (thế đẩy).

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - U_{\text{eff}}]u(r) = 0. \tag{6.41}$$

Thế năng hiệu dụng chứa thế xuyên tâm $U(r)$ và thế ly tâm hoặc thế đẩy $\ell(\ell+1)\hbar^2/2\mu r^2$, ứng với các giá trị mô-men động lượng nhất định. Như sẽ thấy ở phần sau, trong trường hợp nguyên tử Hydro thì $U(r)$ là thế Coulomb gây ra bởi lực hút giữa electron và hạt nhân. Chú ý rằng phương trình (6.41) có dạng giống như phương trình Schrodinger của hạt chuyển động một chiều có khối lượng μ. Điều khác nhau là ở chỗ, trong phương trình (6.41) biến r không thể có giá trị âm mà biến thiên từ $r = 0$ đến $r = +\infty$. Điều này đòi hỏi hàm sóng $\psi(r, \theta, \phi)$ phải hữu hạn trong miền biến thiên của r. Nếu $u(0)$ hữu hạn thì $rR(r)$ phải triệt tiêu tại $r = 0$, nghĩa là

$$\lim_{r \to 0}[rR(r)] = u(0) = 0. \tag{6.42}$$

Như vậy, để cho phương trình (6.41) tương đương với phương trình của chuyển động một chiều ta phải giả sử rằng thế năng của hạt là thế năng hiệu dụng $U_{eff}(r)$ cho trường hợp $r > 0$ và một thế năng vô hạn khi $r \leq 0$ (Hình 6.2).

§ 3 BÀI TOÁN NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

Một trường hợp riêng quan trọng của chuyển động trong trường xuyên tâm là chuyển động của electron trong nguyên tử Hydro và các ion tương tự (He^+, Li^{2+}...vv...). Về mặt nguyên tắc, đây là bài toán hệ hai hạt (electron với điện tích $-e$, khối lượng $m_e = 9.10^{-31}kg$; hạt nhân với điện tích Ze, khối lượng $M = Zm_p$, với $m_p = 1,7.10^{-27}kg$) tương tác nhau bằng thế Coulomb (trong hệ CGS): $U(r) = -Ze^2/r$.

Vì khối lượng của hạt nhân rất lớn so với khối lượng của electron nên bài toán này có thể quy về bài toán một hạt, đó là chuyển động của electron trong trường Coulomb của hạt nhân đứng yên (ta thay $\mu = m_e$). Để giải bài toán này ta chỉ cần giải phương trình (6.39) với thế năng có dạng thế Coulomb

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2}\Big[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}\Big]u(r) = 0. \tag{6.43}$$

3.1 GIÁ TRỊ ÂM CỦA NĂNG LƯỢNG CỦA ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ

Ta khảo sát ý nghĩa của thế năng hiệu dụng trong phương trình bán kính (6.41): $U_{\text{eff}} = -\dfrac{Ze^2}{r} + \dfrac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}$.

Trước hết, ta xét giá trị của nó trong các trường hợp đặc biệt:

+ Khi r bé thì: $U_{\text{eff}} = \hbar^2\ell(\ell+1)/2m_e r^2 > 0$, nếu $r \to 0$ thì $U_{\text{eff}} \to \infty$,

+ Khi r lớn thì: $U_{\text{eff}} = -Ze^2/r < 0$, nếu $r \to \infty$ thì $U_{\text{eff}} \to 0$.

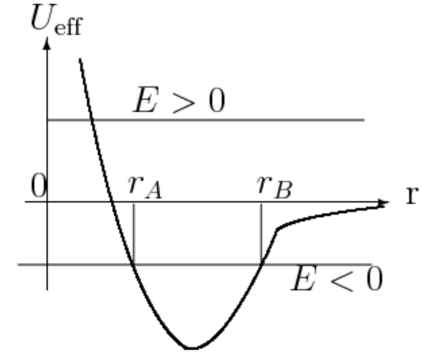
Sự thay đổi của U_{eff} theo r có thể biểu diễn bằng đồ thị ở Hình 6.3.

Từ đồ thị của U_{eff} theo r ta thấy:

(i) Nếu $E > 0$ thì hạt chuyển động từ vô cùng đến, phản xạ tại biên rồi lại đi xa vô cùng.

(ii) Nếu $E < 0$ hạt sẽ chuyển động trong giới hạn trong khoảng r_A và r_B.

Trường hợp (i) ứng với chuyển động ra xa vô cùng. Trường hợp (ii) ứng với hạt chuyển động trong hố thế giới hạn bởi r_A và r_B. Như vậy bài toán chuyển động của electron trong nguyên tử tương ứng với bài toán chuyển động của nó trong hố thế 1 chiều với năng lượng âm.



Hình 6.3: Sự biến thiên của thế năng hiệu dụng theo bán kính.

3.2 NĂNG LƯỢNG VÀ HÀM SÓNG VÀ CỦA ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

Bây giờ ta sẽ giải phương trình (6.43) cho electron trong nguyên tử Hydro và các ion tương tự trong trường hợp năng lượng âm. Muốn vậy, ta dùng phương pháp đổi biến số.

Đặt $x = 2\lambda r$ với $\lambda^2 = -2mE/\hbar^2$, từ đó

$$\frac{d}{dr} = \frac{dx}{dr}\frac{d}{dx} = 2\lambda\frac{d}{dx}.$$

Qua một số phép biến đổi sơ cấp, phương trình (6.43) trở thành:

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \Big[-\frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\Big]u(x) = 0, \tag{6.44}$$

trong đó ta đã đặt: $A = Ze^2\lambda/2|E|$, với lưu ý $|E| = -E$.

Ta xét nghiệm tiệm cận của (6.44):

+ Khi $r \to \infty$ nghĩa là khi $x \to \infty$ thì (6.44) có dạng tiệm cận:

$$u"_\infty - \frac{1}{4}u_\infty = 0, \tag{6.45}$$

trong đó để đơn giản ta đã ký hiệu: $d^2u/dx^2 = u''$. Phương trình này có nghiệm:

$$u_\infty = e^{+x/2} + e^{-x/2}.$$

Do điều kiện giới nội của hàm sóng, ta chọn $u_\infty = e^{-x/2}$.

+ Khi $r \to 0$, nghĩa là hạt tiến về tâm, phương trình (6.44) trở thành:

$$u_0^{''}(x) - \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}u_0(x) = 0.$$

Nghiệm của phương trình có dạng: $u_0(x) = x^s$. Để tìm số mũ s, ta thay $u_0(x)$ và $u_0''(x)$ vào phương trình trên ta tìm được 02 giá trị của s là: $s_1 = \ell + 1; s_2 = -\ell$. Do điều kiện giới nội của hàm sóng ta chọn $s = \ell + 1$, từ đó: $u_0(x) = x^{\ell+1}$.

Trong trường hợp tổng quát, nghiệm của (6.44) có dạng:

$$u(x) = e^{-x/2}x^{\ell+1}v(x), \tag{6.46}$$

trong đó v(x) là một hàm cần tìm.

Để thỏa mãn điều kiện giới nội của hàm sóng, hàm $v(x)$ phải hữu hạn khi $r \to 0$, còn khi $r \to \infty$ thì $v(x) \to \infty$ không nhanh hơn một đa thức của x. Thay $u"(x), u(x)$ vào (6.44) ta được:

$$xv"(x) + [2(\ell+1) - x]v'(x) + [A - (\ell+1)]v(x) = 0. \tag{6.47}$$

Theo lý thuyết của phương trình vi phân, nghiệm của phương trình này có dạng chuỗi:

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k.$$

Tính các đạo hàm $v'(x), v"(x)$ rồi thay vào (6.47) ta được công thức truy toán

$$a_{k+1} = -\frac{A - (\ell+1) - k}{(k+1)[k + 2(\ell+1)]}a_k.$$

Điều kiện giới nội của hàm sóng $\psi(r, \theta, \phi)$ dẫn đến điều kiện giới nội của hàm bán kính $R(r)$ hay hàm $u(r)$, nghĩa là hàm $v(x)$ trong (6.46) phải giới nội. Để cho $v(x)$ hữu hạn, ta phải ngắt chuỗi tại một số hạng nào đó, nghĩa là nó phải trở thành một đa thức. Giả sử ta chọn bậc của đa thức là n_r thì $a_{n_r+1} = 0$. Từ đó:

$$A - (\ell+1) - n_r = 0 \to A = \ell + 1 + n_r = n, \tag{6.48}$$

với n là các số nguyên dương và được gọi là số lượng tử chính. Biểu thức (6.48) cho ta tìm được công thức tính năng lượng:

$$E_n = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{6.49}$$

Từ biểu thức trên ta thấy năng lượng của electron trong nguyên tử Hydro và các ion tương tự bị lượng tử hoá và phụ thuộc vào số lượng tử chính n. Giá trị năng lượng nhỏ nhất E_1 ứng với trạng thái cơ bản của electron. Các trạng thái ứng với $n > 1$ được gọi là các trạng thái kích thích.

Bây giờ, ta tìm hàm sóng ứng với giá trị năng lượng E_n. Hàm sóng này chính là nghiệm của phương trình Schrodinger (6.31). Theo (6.33) ta có: $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$, trong đó $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ chính là hàm cầu có dạng (6.20). Hàm $R(r)$ là nghiệm của phương trình bán kính (6.38).
Ta đã đặt $R(r) = u(r)/r$, với $u(r)$ là nghiệm của phương trình (6.39) và có dạng (6.46), trong đó $v(x)$ là nghiệm của phương trình (6.47). So sánh phương trình này với phương trình cho đa thức Laguerre liên kết:

$$x\frac{d^2L_k^j(x)}{dx^2} + [j+1-x]\frac{dL_k^j(x)}{dx} + (k-j)L_k^j(x) = 0.$$

Ta thấy $v(x)$ có dạng là một đa thức Laguerre nếu:

$$2(\ell+1) = j+1 \quad \text{và } k = n+\ell.$$

Như vậy:

$$v(x) = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(x).$$

Thay $v(x)$ vào (6.46) và chuyển về lại biến r ta được:

$$R_{n\ell}(r) = A_{n\ell}e^{-Zr/(na_0)}\Big(\frac{2Zr}{na_0}\Big)^{\ell} L_{n+\ell}^{2\ell+1}\Big(\frac{2Zr}{na_0}\Big). \tag{6.50}$$

Hệ số $A_{n\ell}$ được xác định từ điều kiện chuẩn hoá:$\int_0^\infty |R_n\ell(r)|^2 r^2 dr = 1$.
Thay dạng của $R_{n\ell}$ vào (6.50) và dùng điều kiện trực giao của đa thức Laguerre liên kết ta tìm được:

$$A_{n\ell} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-\ell-1)!Z^3}{[(n+\ell)!]^3 a_0^3}}. \tag{6.51}$$

Trong các biểu thức trên ta đã sử dụng đại lượng $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$ được gọi là bán kính Bohr thứ nhất. Sau đây là một vài dạng của hàm bán kính $R_{n\ell}(r)$ cho trường hợp nguyên tử Hydro $Z = 1$.

$$R_{10}(r) = 2a_0^{-3/2} e^{-r/a_0} \qquad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{6a_0^3}} \frac{r}{2a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \qquad R_{31}(r) = \frac{8}{9\sqrt{6a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) \left(\frac{r}{3a_0}\right) e^{-r/3a_0}$$

$$R_{30}(r) = \frac{2}{3\sqrt{3a_0^3}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0} \quad R_{32}(r) = \frac{4}{9\sqrt{30a_0^3}} \left(\frac{r}{3a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}. \tag{6.52}$$

Với dạng của hàm cầu và hàm bán kính đã biết, ta sẽ viết được dạng của hàm sóng ứng với các giá trị cụ thể của các số lượng tử n, ℓ, m.

3.3 KẾT LUẬN VỀ BÀI TOÁN NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

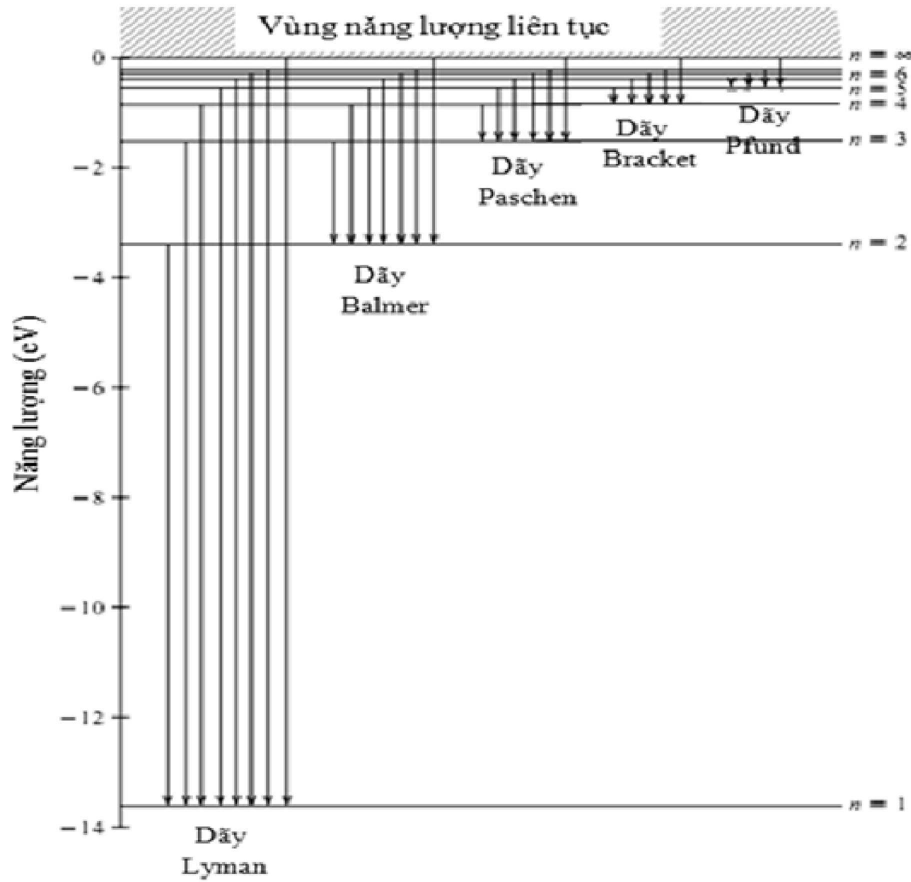
a) Sự lượng tử hóa năng lượng

Theo công thức (6.50) năng lượng của electron chỉ phụ thuộc vào số nguyên n. Ta có thể viết lại công thức năng lượng như sau:

$$E_n = -R\frac{Z^2}{n^2} \qquad \text{trong đó } R = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \text{ là hằng số Ridberg} \tag{6.53}$$

Vì n có các giá trị khả dĩ là $1, 2, 3...$ nên năng lượng có giá trị gián đoạn, nghĩa là bị lượng tử hóa. Hình 6.3 biểu diễn sơ đồ mức năng lượng của electron trong nguyên tử Hydro ($Z = 1$). Khi $n = 1$ thì $E = -13,55\ eV$.

Khi n tăng thì giá trị âm của năng lượng giảm dần. Giá trị năng lượng $E = 0$ ứng với $n = \infty$. Giá trị năng lượng $E > 0$ ứng với trường hợp electron bị bứt ra khỏi nguyên tử và trở thành electron tự do, lúc đó năng lượng biến thiên liên tục. Dựa vào sơ đồ năng lượng trên ta cũng có thể giải thích sự tạo thành quang phổ vạch của nguyên tử Hydro, điều mà lý thuyết Bohr về nguyên tử Hydro đã đưa ra trước khi có cơ học lượng tử (Hình 6.4).



Hình 6.4: Sơ đồ mức năng lượng của electron có thể giải thích sự hình thành quang phổ vạch của nguyên tử Hydro

b) Sự suy biến của năng lượng

Năng lượng của electron trong nguyên tử Hydro và các ion tương tự E_n tương ứng với hàm sóng $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$. Đây là hàm sóng mô tả trạng thái nguyên tử có năng lượng và mô-men động lượng xác định. Vì ứng với một giá trị của n có một số giá trị của ℓ và m, nên ứng với một giá trị năng lượng E_n sẽ có một số hàm sóng $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)$. Ta nói năng lượng của electron trong nguyên tử bị suy biến. Bậc suy biến g_n có thể được tính như sau:

Một giá trị của n tương ứng với n giá trị của ℓ ($\ell = 0, 1, ...n-1$), trong lúc đó ứng với một giá trị của ℓ sẽ có $2\ell+1$ giá trị của m ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$). Như vậy, số giá trị của m ứng với một giá trị xác định của n sẽ là số hàm sóng ứng

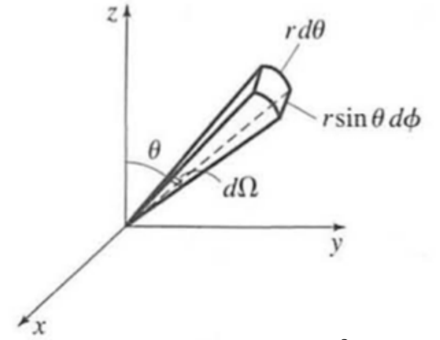
với một giá trị năng lượng, nghĩa là bậc suy biến.

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = 1+3+5\ldots(2n-1) = (1+2n-1)n/2 = n^2. \qquad (6.54)$$

§ 4 SỰ PHÂN BỐ ELECTRON TRONG NGUYÊN TỬ HYDRO VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

Mật độ xác suất tìm electron chung quanh hạt nhân nguyên tử tại một điểm có toạ độ (r,θ,ϕ) là:

$$\rho_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = |\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)|^2. \qquad (6.55)$$



Xác suất để tìm electron trong phần tử thể tích dV tại lân cận điểm (r,θ,ϕ) có toạ độ ở trong khoảng $r \to r+dr; \theta \to \theta+d\theta; \phi \to \phi+d\phi$ là: $dW_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = \rho_{n\ell m}(r,\theta,\phi)dV = |\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)|^2 dV$.

Vì trong toạ độ cầu $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$, nên:

$$dW_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr. Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2 d\Omega,$$

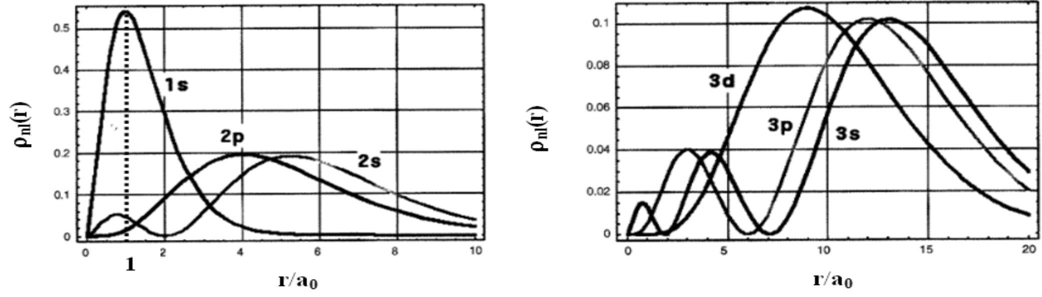
với $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ là phần tử góc khối.

Như vậy xác suất tìm electron trong nguyên tử được tách thành hai số hạng độc lập: số hạng thứ nhất chỉ phụ thuộc vào bán kính r mô tả xác suất tìm hạt theo bán kính; số hạng thứ hai phụ thuộc vào hai góc θ và ϕ mô tả sự phân bố của electron theo hướng. Sau đây ta sẽ khảo sát hai loại xác suất này.

4.1 SỰ PHÂN BỐ ELECTRON THEO BÁN KÍNH

Bây giờ ta tìm mật độ xác suất tìm hạt trong khoảng bán kính từ $r \to r+dr$ nghĩa là ta xét lớp cầu có bề dày dr. Xác suất tìm electron lúc đó bằng:

$$dW_{n\ell}(r) = |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr \int_\Omega |Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2 d\Omega. \qquad (6.56)$$



Hình 6.5: Sự phụ thuộc của $\rho_{n\ell}(r)$ vào bán kính ứng với các trạng thái khác nhau.

Do điều kiện chuẩn hoá của hàm cầu $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ nên tích phân theo góc ở (6.56) bằng đơn vị, từ đó công thức tính mật độ xác suất tìm hạt theo bán bính sẽ là

$$\rho_{n\ell}(r) = \frac{dW_{n\ell}(r)}{dr} = |R_{n\ell}(r)|^2 r^2. \tag{6.57}$$

Từ (6.57) ta thấy mật độ xác suất tìm electron theo bán kính là một hàm của bán kính r và phụ thuộc vào 2 số lượng tử n và ℓ. Đây là lý do vì sao ta nói electron trong nguyên tử ở trên các lớp vỏ điện tử khác nhau (n khác nhau). Thay biểu thức của hàm bán kính ứng với các giá trị cụ thể của n và ℓ vào (6.57) ta sẽ được biểu thức của $\rho_{n\ell}(r)$ ứng với các trạng thái khác nhau của electron.

Chẳng hạn, ở trạng thái cơ bản 1s ($n = 1, \ell = 0$) hàm bán kính $R_{10}(r)$ là

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_0)^{3/2} e^{-Zr/a_0}.$$

Do đó, mật độ xác suất theo (6.57) có dạng:

$$\rho_{10}(r) = |R_{10}(r)|^2 = 4(Z/a_0)^3 r^2 e^{-2Zr/a_0}. \tag{6.58}$$

Hàm này có một cực đại tại $r = a_0/Z$. Đối với nguyên tử Hydro (Z=1) thì $r = a_0$, nghĩa là ở trạng thái cơ bản, xác suất tìm electron là cực đại tại vị trí cách hạt nhân một khoảng bằng bán kính Bohr thứ nhất. Đối với các trạng thái có $n \geq 2$ thì đường cong phân bố mật độ xác suất có $n - \ell$ cực đại (Hình 6.5).

Ví dụ 3.1:

(a) Tìm giá trị của bán kính r để mật độ xác suất tìm electron theo bán kính trong nguyên tử Hydro ở trạng thái 2p là lớn nhất.

(b) Tìm trị trung bình của r ở trạng thái 2p đối với nguyên tử Hydro và so sánh với giá trị của r ở câu a). Giải thích kết quả nhận được?

Lời giải:

Mật độ xác suất tìm electron ở trạng thái $2p$ $(n = 2, \ell = 1)$ là

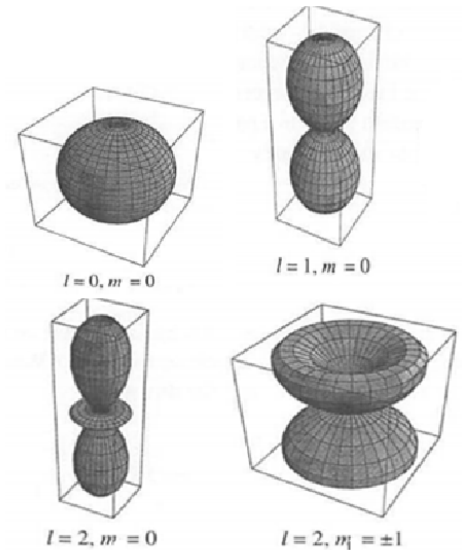
$$\rho_{21}(r) = |R_{21}(r)|^2 r^2, \tag{6.59}$$

trong đó hàm bán kính $R_{21}(r) = re^{-r/2a_0}/\sqrt{24a_0^5}$. Thay vào (6.59) rồi lấy đạo hàm theo r và cho bằng không ta tìm được: $r_{max} = 4a_0$.

(b) Trị trung bình của r ở trạng thái 2p là

$$\overline{r}_{21} = \int_0^\infty rR_{21}^* R_{21} dV_r = \frac{1}{24a_0^5}\int_0^\infty r^5 e^{-r/a_0} dr,$$

với lưu ý là $dV_r = r^2 dr$, tính ra ta được $\overline{r}_{21} = 5a_0$. Ta thấy r_{max} ở câu a) và $\overline{r}_{21}$ ở đây khác nhau. Lý do là ở chỗ đường cong của mật độ xác suất tìm hạt theo bán kính ở trạng thái 2p (hàm $\rho_{21}(r)$ trong đồ thị của Hình 6.5 không đối xứng qua đỉnh cực đại, vì vậy mặc dù xác suất tìm electron lớn nhất là ở $4a_0$ nhưng giá trị trung bình trong phép đo vị trí này là $5a_0$.



Hình 6.6: Sự phụ thuộc theo góc của mật độ xác suất tìm electron trong nguyên tử Hydro.

4.2 SỰ PHÂN BỐ ELECTRON THEO GÓC

Bây giờ ta tìm mật độ xác suất tìm electron theo góc, nghĩa là theo các hướng của không gian, trong trường hợp bán

kính trải dài từ 0 đến ∞. Xác suất tìm
electron trong trường hợp này sẽ bằng:

$$dW_{\ell m}(\theta,\phi) = |Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2 d\Omega \int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 r^2 dr. \tag{6.60}$$

Do điều kiện chuẩn hoá của hàm bán kính $R_{n\ell}(r)$ nên tích phân theo bán kính ở (6.60) bằng đơn vị, từ đó công thức tính mật độ xác suất tìm electron theo góc sẽ là:

$$\rho_{\ell m}(\theta,\phi) = \frac{dW_{\ell m}(\theta,\phi)}{d\Omega} = |Y_\ell^m(\theta,\phi)|^2. \tag{6.61}$$

Thay biểu thức của hàm cầu với các giá trị cụ thể của ℓ và m ta sẽ được biểu thức của $\rho_{\ell m}(\theta,\phi)$ ứng với các trạng thái khác nhau của electron. Chẳng hạn, ở trạng thái cơ bản, n = 1, $\ell = 0, m = 0$, hàm cầu $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$ do đó mật độ xác suất trong trường hợp này không phụ thuộc vào góc. Các đồ thị ở hình Hình 6.6 biểu diễn sự phân bố xác suất theo góc ứng với một số trạng thái khác nhau.

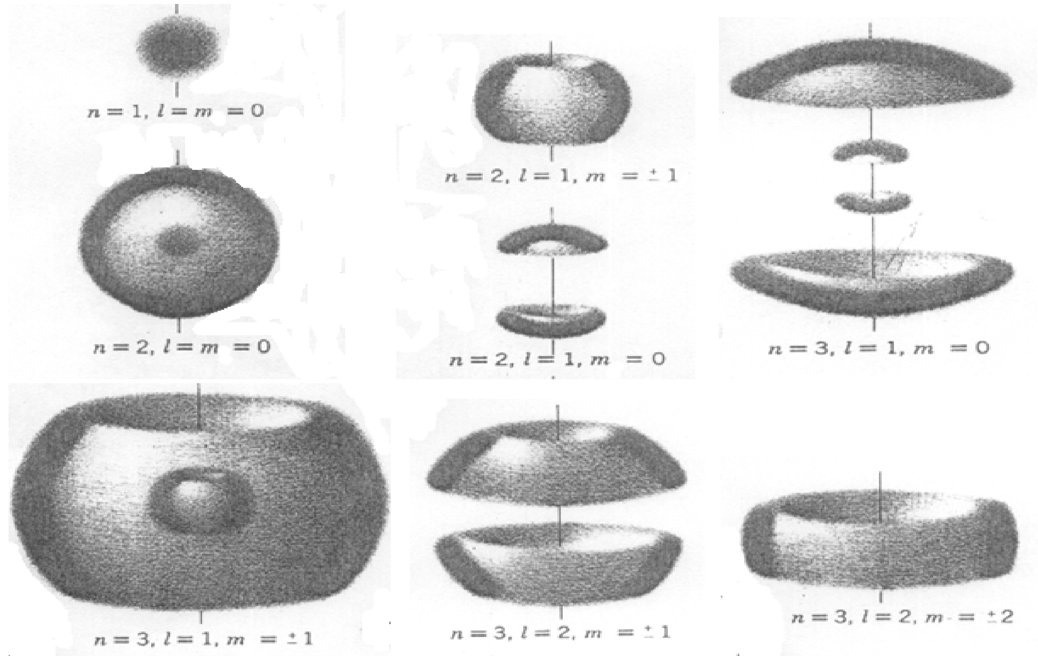
Kết hợp phân bố xác suất theo bán kính và theo góc ta được sự phân bố xác suất của electron trong không gian chung quanh hạt nhân của nguyên tử. Hình 6.7 biểu diễn hàm phân bố xác suất toàn phần $\rho_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = |\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)|^2$.

§ 5 TÓM TẮT CHƯƠNG 6

- Trong hệ tọa độ cầu, toán tử hình chiếu mô-men xung lượng và toán tử mô-men toàn phần có trị riêng gián đoạn. Trị riêng của $\hat{L}_z$ phụ thuộc vào số lượng tử từ m, trị riêng của toán tử $\hat{L}^2$ phụ thuộc vào số lượng tử quỹ đạo ℓ.

- Bằng phương pháp phân ly biến số, ta có thể quy bài toán giải phương trình Schrodinger trong trường xuyên tâm về bài toán giải phương trình bán kính.

- Giải phương trình Schrodinger cho nguyên tử Hydro ta đi đến kết quả là



Hình 6.7: Sự phân bố xác suất của electron trong nguyên tử Hydro ở các trạng thái khác nhau (ứng với tập các số lượng tử khác nhau).

electron trong nguyên tử Hydro có giá trị âm và bị lượng tử hóa. Xác suất tìm electron chung quanh hạt nhân nguyên tử phụ thuộc vào trạng thái, từ đó ta đi đến hình ảnh các đám mây điện tử, biểu diễn vị trí của electron trong nguyên tử Hydro nói riêng và các nguyên tử khác nói chung.

§ 6 BÀI TẬP CHƯƠNG 6

1. Đặt: $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ và $\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$

   Chứng minh các hệ thức sau:

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z; \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm; \qquad \hat{L}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$$

2. Tìm trị riêng và hàm riêng chuẩn hoá của toán tử L_z^2.

3. Tìm trị trung bình của L^2 ứng với trạng thái $\psi(\theta, \phi) = A\sin\theta\cos\phi$

4. Hàm sóng electron trong nguyên tử Hydro ở trạng thái cơ bản có dạng: $\psi(r,\theta,\phi) = Ae^{-r/a_0}$. Tìm hệ số chuẩn hóa A và các trị trung bình của r và r^2.

5. Một hạt ở trạng thái có các số lượng tử $\ell = 1; m = 0$. Tính xác suất để hạt nằm trong hình nón có trục đối xứng là Oz và có góc hợp bởi đường sinh và trục Oz là $\pi/4$..

6. Hàm sóng của electron trong nguyên tử Hydro tại thời điểm $t = 0$ có dạng:
$$\psi(r,0) = \frac{1}{\sqrt{10}}(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}).$$
(a) Tìm trị trung bình của năng lượng.

(b) Tìm xác suất tìm electron ở khoảng 10^{-10} cm kể từ tâm.

7. Hàm sóng chuẩn hoá của nguyên tử đồng dạng Hydro ở trạng thái cơ bản là: $\psi = A\exp(-\beta r)$; trong đó A và β là hằng số. Chứng minh:
a) $A^2 = \beta^3/\pi,\ \beta = Z/a_0$.
b) Năng lượng $E = -Z^2E_0$, trong đó $E_0 = m_e e^4/2\hbar^2$.
c) Trị trung bình của thế năng và động năng lần lượt là 2E và -E.
d) Trị trung bình của r là $\overline{r} = 3a_0/2Z$.

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. a) Đặt: $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ và $\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$.
+ $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = [\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_x - i\hat{L}_y]$. Sử dụng hệ thức giao hoán giữa các toán tử hình chiếu mô-men xung lượng ta được biểu thức cần chứng minh.
b) Ta chỉ cần chứng minh $[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = +\hbar\hat{L}_+$.
c) Trước hết ta tính tích:
$$\hat{L}_+\hat{L}_- = (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = L_x^2 + L_y^2 + \hbar\hat{L}_z \quad (*)$$
Sử dụng hệ thức:
$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z \Rightarrow \hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{L}_-\hat{L}_+ + 2\hbar\hat{L}_z \quad (**).$$

So sánh (*) và (**), ta được:

$$L_x^2 + L_y^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar\hat{L}_z, \quad \text{hay } L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + L_z^2 + \hbar\hat{L}_z.$$

Để ý hệ thức: $\hat{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, ta được hệ thức cần chứng minh.

2. Phương trình trị riêng của toán tử $\hat{L_z^2}$ là: $\hat{L_z^2}\psi(\phi) = L_z^2\psi(\phi)$,
thay $\hat{L_z^2} = -\hbar^2\frac{d^2}{d\phi^2}$ vào, ta được phương trình: $\dfrac{d^2\psi(\phi)}{d\phi^2} + \dfrac{L_z^2}{\hbar^2}\psi(\phi) = 0$,
hay $\dfrac{d^2\psi(\phi)}{d\phi^2} + m^2\psi(\phi) = 0$, trong đó $m = \dfrac{L_z}{\hbar}$.
Nghiệm của phương trình là: $\psi(\phi) = Ae^{im\phi}$. Trị riêng có dạng: $L_z^2 = m^2\hbar^2$.
Chuẩn hoá hàm sóng ta được: $A = 1/\sqrt{2\pi}$. Hàm riêng chuẩn hóa là: $\psi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\frac{i}{\hbar}L_z\phi}$.

3. a) Điều kiện chuẩn hoá: $|A|^2\int_\Omega \sin^2\theta\cos^2\phi d\Omega = 1$, trong đó phần tử góc khối có dạng: $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$. Tính ra, ta được: $A = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$.
b) $\overline{L^2} = \int_\Omega \psi^*(\theta,\phi)\hat{L^2}\psi(\theta,\phi)d\Omega$,
thay
$$\hat{L^2} = -\hbar^2\Delta_{\theta,\phi} = -\hbar^2\Big(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big)$$
và dạng của hàm $\psi(\theta,\phi)$, sau khi tính toán ta được: $\overline{L^2} = 2\hbar^2$

4. a) Dùng điều kiện chuẩn hóa hàm sóng trong hệ tọa độ cầu:
$$1 = |A|^2\int_r\int_\theta\int_\phi e^{-2r/a_0}r^2dr\sin\theta d\theta d\phi$$
$$1 = |A|^2\int_0^\infty e^{-2r/a_0}r^2dr\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi.$$
Tính lần lượt các tích phân:
+ $\int_0^\pi \sin\theta d\theta = 2$
+ $\int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi$
+ Để tính tích phân $\int_0^\infty e^{-2r/a_0}r^2dr$, ta sử dụng công thức:
$\displaystyle\int_0^\infty x^ne^{-\beta x}dx = \frac{n!}{\beta^{n+1}}$, tính ra ta được: $\int_0^\infty e^{-2r/a_0}r^2dr = \frac{a_0^3}{4}$. Như vậy:

$A = \dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$.

b) Trị trung bình: $\overline{r} = \int_V \psi^* \hat{r} \psi dV = |A|^2 \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$, tính ra ta được: $\overline{r} = \frac{3a_0}{2}$.

Tương tự: $\overline{r^2} = \int_V \psi^* \hat{r^2} \psi dV = |A|^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = 1$, tính tích phân này ta được: $\overline{r^2} = 3a_0$.

5. Ở trạng thái $\ell = 1, m = 0$ thì hàm riêng của toán tử $\hat{L^2}$ có dạng:

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta.$$

Mật độ xác suất tìm hạt ở trạng thái này là:

$$\rho_{1,0} = |Y_{1,0}|^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta.$$

Mật độ xác suất này không phụ thuộc vào góc ϕ. Như vậy hạt phân bố đối xứng qua trục z. Gọi W là xác suất để hạt nằm trong hình nón có trục đối xứng Oz và có góc hợp bởi đường sinh và trục Oz là $\pi/4$ thì:

$$W = \int_0^{\pi/4} \rho_{1,0} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/4} \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta \sin\theta d\theta.$$

Tính ra ta được: $W = (4 - \sqrt{2})/8$.

6. (a) Trị trung bình của năng lượng được tính theo công thức

$$\begin{aligned} \bar{E} &= < \psi(r,0)|\hat{H}|\psi(r,0) > \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}}(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1})|\hat{H}|\frac{1}{\sqrt{10}}(2\psi_{100} + \psi_{210} \\ &+ \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}). \end{aligned}$$

Vì $\hat{H}\psi_{n\ell m} = E_n \psi_{n\ell m}$ nên

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{1}{10}(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1})|2E_1\psi_{100} + E_2\psi_{210} \\ &+ \sqrt{2}E_2\psi_{211} + \sqrt{3}E_2\psi_{21-1}) \\ &= \frac{1}{10}(4E_1 + E_2 + 2E_2 + 3E_2) = \frac{1}{10}(4E_1 + 6E_2). \end{aligned}$$

Vì $E_2 = E_1/4$ nên $\bar{E} = 11E_1/20 = -13,6 \times 11/20 = -7,48\text{eV}$.

(b) Đặt $\alpha = 10^{-10}$ cm. Ta tìm xác suấttìm hạt theo bán kính:

$$P = \int_0^\alpha \int_\Omega \psi^*_{n\ell m}\psi_{n\ell m} r^2 dr d\Omega.$$

Vì $\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ nên

$$P = \int_0^\alpha \frac{1}{10}(4|R_{10}|^2 + 6|R_{21}|^2)r^2 dr.$$

Thay dạng của hàm bán kính

$$|R_{10}|^2 = \frac{4}{a_0^3}e^{-2r/a_0}, \quad |R_{21}|^2 = \frac{r^2}{24a_0^5}e^{-r/2a_0},$$

trong đó $a_0 = 5,29 \times 10_{-9}$ cm. Ta thấy rằng $\alpha \ll a_0$ nên ta có công thức gần đúng sau:

$$e^{-2r/a_0} \approx 1 - \frac{2r}{a_0}, \quad e^{-r/2a_0} \approx 1 - \frac{r}{2a_0},$$

nên

$$\begin{aligned} P &\approx \frac{4}{10}\int_0^\alpha \frac{4}{a_0^3}\left(1 - \frac{2r}{a_0}\right) r^2 dr + \frac{6}{10}\int_0^\alpha \frac{r^2}{24a_0^5}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r^2 dr \\ &= \left[\frac{4}{3}\left(\frac{\alpha}{a_0}\right)^3 - 2\frac{4}{3}\left(\frac{\alpha}{a_0}\right)^4\right]\frac{4}{10} + \frac{6}{10}\left[\frac{1}{120}\left(\frac{\alpha}{a_0}\right)^5 - \frac{1}{288}\left(\frac{\alpha}{a_0}\right)^6\right] \\ &\approx \frac{8}{15}\left(\frac{\alpha}{a\,0}\right)^3 \approx 3,6 \times 10^{-6}. \end{aligned}$$

7. + Dùng điều kiện chuẩn hoá

$$\int_V \psi^*\psi dV = 1.$$

Thay $\psi = A\exp(-\beta r)$ và tính tích phân trong tọa độ cầu với lưu ý: $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi$, ta tìm được: $A^2 = \beta^2/\pi$.

+ Phương trình Schrodinger của nguyên tử có dạng:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\psi = E\psi,$$

trong đó toán tử Laplace trong hệ toạ độ cầu là:

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2}\triangle_{\theta,\phi}; \quad \text{và } U(r) = -Ze^2/r,$$

thay dạng của Δ, của U(r), của ψ vào phương trình trên và biến đổi ta được phương trình sau:

$$\left(\frac{\hbar^2\beta^2}{2m} + E\right) + \frac{1}{r}\left(Ze^2 - \frac{\beta\hbar^2}{m}\right) = 0. \tag{6.62}$$

Số hạng thứ 2 ở trong ngoặc (...) của phương trình này phải bằng 0, từ đó ta được: $\beta = mZe^2/\hbar^2 = Z/a_0$, với $a_0 = \hbar^2/me^2$.

b) Vì số hạng thứ nhất của phương trình (6.62) phải bằng không, nên ta được:

$$E = -\hbar^2\beta^2/2m = ... = -Z^2E_0, \text{ với } E_0 = me^4/2\hbar^2.$$

c) Trị trung bình của thế năng là:

$$\overline{U} =< \psi|U|\psi >= A^2\int_V -\frac{Ze^2}{r}e^{-2\beta r}dV,$$

tính tích phân này trong toạ độ cầu, ta được: $\bar{U} = 2E$.

Trị trung bình của động năng là:

$$\overline{T} =< \psi|\hat{H} - U|\psi >=< \psi|\hat{H}|\psi > - < \psi|U|\psi >= E - 2E = -E.$$

d) Trị trung bình của r là:

$$\overline{r} = A^2\int_V re^{-2\beta r}dV,$$

tính tích phân này trong hệ toạ độ cầu, ta được: $\overline{r} = 3a_0/2Z$.

Chương 7

Lý thuyết biểu diễn

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là khảo sát dạng ma trận của cơ lượng tử trong đó các đại lượng cơ bản được biểu diễn dưới dạng ma trận. Cách biểu diễn này cho phép ta sử dụng đại số tuyến tính để khảo sát cơ lượng tử một cách tổng quát hơn, trong đó các vấn đề đã xét trước đây như hàm sóng, toán tử, phương trình Schrodinger, phương trình Heisenberg ... đều được viết dưới dạng ma trận.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ nắm được các cách biểu diễn khác nhau sử dụng trong cơ lượng tử, trong đó chủ yếu là biểu diễn tọa độ, biểu diễn xung lượng và biểu diễn năng lượng. Sinh viên cũng sẽ nắm được lý thuyết cơ bản về sự chuyển đổi giữa các biểu diễn khác nhau, đồng thời bước đầu nắm được ba cách biểu diễu cơ bản trong cơ lượng tử, đó là biểu diễn Schrodinger, biểu diễn Heisenberg và biểu diễn tương tác.

§ 1 KHÁI NIỆM VỀ BIỂU DIỄN

Ta đã biết trạng thái của một hệ lượng tử được mô tả bằng hàm sóng $\Psi(x, t)$ là một phần tử của không gian Hilbert. Hàm sóng ở đây phụ thuộc vào biến số tọa độ và thời gian. Như đã khảo sát ở Chương I, bình phương môđun của hàm sóng thì tỉ lệ với mật độ xác suất đo tọa độ của hạt (xác suất tìm hạt) tại

thời điểm t. Hàm sóng như trên sẽ là một hàm của tọa độ và ta nói hàm sóng đã được cho trong biểu diễn tọa độ hay x-biểu diễn. Ta đã biết dạng của các toán tử cơ bản trong biểu diễn này là:

$$\hat{x} = x; \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}; \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}; \hat{L}^2 = -\hbar^2\triangle_{\theta,\varphi}. \tag{7.1}$$

Cách biểu diễn như trên không phải là duy nhất mà còn những cách biểu diễn khác trong đó hàm sóng phụ thuộc vào các biến số khác nhau ứng với các đại lượng động lực khác nhau.

Nếu hàm sóng là hàm của biến số xung lượng thì bình phương môđun hàm sóng sẽ tỉ lệ với mật độ xác suất đo xung lượng:

$$|\varphi(p)|^2 \propto \rho(p). \tag{7.2}$$

Nếu hàm sóng là hàm của biến số năng lượng thì bình phương môđun hàm sóng sẽ tỉ lệ với xác suất đo năng lượng:

$$|\varphi(E)|^2 \propto w(E). \tag{7.3}$$

Nói chung, nếu hàm sóng phụ thuộc vào một biến số ứng với một đại lượng động lực F nào đó thì ta nói hàm sóng được viết trong F-biểu diễn, lúc đó $\varphi = \varphi(F)$. Trong biểu diễn này thì:

$$|\varphi(F)|^2 \propto w(F) \text{ nếu } \hat{F} \text{ có phổ trị riêng gián đoạn} \tag{7.4}$$

hoặc

$$|\varphi(F)|^2 \propto \rho(F) \text{ nếu phổ trị riêng của } \hat{F} \text{ liên tục.} \tag{7.5}$$

Trong chương II chúng ta đã biết các hàm riêng của toán tử Hermite $\hat{F}$ (ứng với đại lượng động lực F) tạo thành hệ cơ sở trực chuẩn cho không gian Hilbert các hàm sóng và ta có khai triển:

$$\psi(x) = \sum_n c_n f_n, \text{ trường hợp } \hat{F} \text{ có phổ trị riêng gián đoạn,} \tag{7.6}$$

$$\psi(x) = \int_f c_f \psi_f df, \text{ trường hợp } \hat{F} \text{ có phổ trị riêng liên tục.} \tag{7.7}$$

Vì f_n hoặc ψ_f là hệ cơ sở của không gian các hàm sóng $\{\psi\}$ nên các hệ số c_n hoặc c_f hoàn toàn đủ để xác định hàm sóng ψ, nghĩa là đủ để xác định trạng thái của hạt. Ta nói rằng tập các hệ số c_n hoặc c_f là hàm sóng trong F-biểu diễn. Như vậy, tuỳ theo việc chọn hệ hàm cơ sở mà ta có các biểu diễn khác nhau.

§ 2 BIỂU DIỄN CÁC TRẠNG THÁI LƯỢNG TỬ

Hàm sóng $\psi(x)$ trong x-biểu diễn một trạng thái lượng tử. Ta xét toán tử $\hat{F}$ với phương trình trị riêng:

$$\hat{F} f_n = a_n f_n. \tag{7.8}$$

Khai triển hàm ψ theo các hàm riêng f_n của toán tử $\hat{F}$

$$\psi(x) = \sum_n c_n f_n, \tag{7.9}$$

hệ số c_n trong phương trình trên tìm được nhờ điều kiện trực chuẩn của hàm riêng f_n

$$\langle f_m|\psi\rangle = \langle f_m|\sum_n c_n f_n\rangle = \sum_n c_n \langle f_m|f_n\rangle = c_m. \tag{7.10}$$

Vậy:

$$c_n = \langle f_n|\psi\rangle. \tag{7.11}$$

Hệ số c_n hoặc c_f được gọi hàm sóng trong F-biểu diễn. Sau đây, ta xét một vài biểu diễn cơ bản trong cơ học lượng tử.

2.1 BIỂU DIỄN NĂNG LƯỢNG

Ta xét trường hợp năng lượng có giá trị gián đoạn, lúc đó hàm riêng của toán tử năng lượngđược viết dưới dạng ψ_{E_n}, thay vì viết ψ_n như trước đây. Khai triển hàm sóng $\psi(x)$ theo hàm riêng của toán tử năng lượng ψ_{E_n}

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_{E_n}, \tag{7.12}$$

hệ số c_n trong khai triển (7.12) chính là hàm sóng trong E-biểu diễn.

$$c_n = \varphi(E_n) = \langle\psi_{E_n}|\psi(x)\rangle. \tag{7.13}$$

Theo ý nghĩa thống kê của hàm sóng thì

$$|\varphi(E_n)|^2 \propto w(E_n),$$

với $w(E_n)$ là xác suất để năng lượng có giá trị E_n. Điều này phù hợp với nội dung của Tiên đề III.

Ta tìm điều kiện chuẩn hóa của hàm $\varphi(E_n)$ từ điều kiện chuẩn hoá của hàm $\psi(x)$: $\langle\psi(x)|\psi(x)\rangle = 1$. Thay khai triển (7.12) vào tích vô hướng này, ta được:

$$\sum_m \langle\varphi_m(E_m)\psi_m| \sum_n \varphi_n(E_n)\psi_n\rangle = 1,$$

hay:

$$\sum_{n,m} \varphi_m^*(E_m)\varphi_n(E_n)\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_{n,m} \varphi_m^*(E_m)\varphi_n(E_n)\delta_{nm} = 1,$$

từ đó

$$|\varphi_n(E_n)|^2 = 1. \tag{7.14}$$

Biểu thức (7.14) chính là điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng trong E-biểu diễn.

2.2 BIỂU DIỄN XUNG LƯỢNG

Khai triển hàm sóng $\psi(x)$ theo hàm riêng của toán tử xung lượng $\psi_p(x)$:

$$\psi(x) = \int_p c_p\psi_p dp, \tag{7.15}$$

hệ số $c_p = \varphi(p)$ trong (7.15) chính là hàm sóng trong biểu diễn xung lượng (p-biểu diễn). Theo ý nghĩa thống kê của hàm sóng thì:

$$|\varphi(p)|^2 \propto \rho(p),$$

trong đó, $\rho(p)$ là mật độ xác suất đo xung lượng. Điều kiện chuẩn hoá của $\varphi(p)$ được suy từ điều kiện chuẩn hoá của hàm $\psi(x)$: $\langle\psi(x)|\psi(x)\rangle = 1$.
Thay khai triển (7.15) vào tích vô hướng này, ta được:

$$1 = \langle \int_{p'} \varphi(p')\psi_{p'}dp'| \int_p \varphi(p)\psi_p dp\rangle = \int_{p'}\int_p \varphi^*(p')\varphi(p)\langle\psi'_p|\psi_p\rangle dp'dp, \quad (7.16)$$

hay:

$$\int_{p'}\int_p \varphi^*(p')\varphi(p)\delta(p'-p)dp'dp = 1 \Rightarrow \int_p |\varphi(p)|^2 dp = 1. \quad (7.17)$$

Đây là điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng trong p-biểu diễn.

Ví dụ 1.1:

Hạt trong giếng thế một chiều vuông góc sâu vô hạn ở trạng thái: $\psi(x) = Ax(L-x)$. Tìm hàm sóng trong biểu diễn năng lượng và tính năng lượng trung bình của hạt.

Lời giải:

Chuẩn hoá hàm sóng $\psi(x) = Ax(L-x)$, ta được $A = \sqrt{(30/L^5)}$.
Dạng của hàm sóng $\psi(x)$ trong biểu diễn năng lượng là:

$$\varphi(E_n) =< \psi_n(x)|\psi(x)>; \text{ trong đó: } \psi_n(x) = \sqrt{2/L}\sin(n\pi x/L),$$

thay dạng của 2 hàm sóng $\psi(x)$ và $\psi_n(x)$ vào, ta được:

$$\varphi(E_n) = \sqrt{60/L^6}\int_0^L (Lx - x^2)\sin\frac{n\pi x}{L}dx.$$

Tính tích phân này ta được kết quả:

$$\varphi(E_n) = \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3}[1-(-1)^n].$$

Năng lượng trung bình được tính theo công thức: $\overline{E} = \sum_n E_n w_n$. Theo ý nghĩa thống kê của hàm sóng thì trong E-biểu diễn: $|\varphi_n(E)|^2 = w_n(E)$, và $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/2mL^2$.
Thay vào, ta được: $\overline{E} = \dfrac{480}{mL^2\pi^4}\sum_{n=1,3,5}\dfrac{1}{n^4}$. Để ý rằng: $\sum_{n=1,3,5}\dfrac{1}{n^4} = \dfrac{\pi^4}{96}$, ta tính được: $\overline{E} = \dfrac{5\hbar^2}{mL^2}$.

Ví dụ 1.2:

Trong toạ độ biểu diễn, hàm sóng của hạt có dạng: $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}$. Tìm dạng của hàm sóng này trong biểu diễn xung lượng.

Lời giải:

Trong p-biểu diễn, hàm sóng có dạng: $\varphi(p) =< \psi_p(x)|\psi(x) >$, trong đó $\psi_p(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x . x}$ là hàm riêng của toán tử $\hat{p}_x$.
Thay vào tích vô hướng trên ta được:

$$\varphi(p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0 - p)x} dx, \quad \text{trong đó ta đã ký hiệu } p_x = p. \tag{7.18}$$

Theo định nghĩa của hàm delta:

$$\delta(p - p_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p - p_0)x} dx,$$

thì phương trình (7.98) trở thành

$$\varphi(p) = \frac{1}{\hbar}\delta\left(\frac{p - p_0}{\hbar}\right) = \delta(p - p_0).$$

§ 3 BIỂU DIỄN MA TRẬN CỦA TOÁN TỬ

Như đã biết ở Chương II, phương trình toán tử

$$\hat{A}\psi = \varphi \tag{7.19}$$

chuyển hàm ψ thành hàm φ. Nếu ta chọn x-biểu diễn thì hàm ψ và ϕ là của tọa độ, toán tử $\hat{A}$ phụ thuộc tọa độ và đạo hàm của tọa độ $\hat{A} = \hat{A}(-i\hbar\nabla, \vec{r})$. Lúc đó phương trình (7.19) có dạng (viết trong trường hợp 1 chiều theo trục x):

$$\hat{A}\psi(x) = \varphi(x) \tag{7.20}$$

Bây giờ, ta tìm dạng của $\hat{A}$ trong một biểu diễn bất kỳ, chẳng hạn như trong biểu diễn của toán tử $\hat{F}$ (F-biểu diễn), với phương trình trị riêng:

$$\hat{F} f_n = F_n f_n \quad \text{đối với trường hợp phổ gián đoạn} \tag{7.21}$$

hoặc

$$\hat{F}\psi_f = F\psi_f \quad \text{đối với trường hợp phổ liên tục.} \tag{7.22}$$

3.1 TRƯỜNG HỢP TOÁN TỬ $\hat{F}$ CÓ PHỔ TRỊ RIÊNG GIÁN ĐOẠN

Khai triển hàm $\psi(x)$ và $\varphi(x)$ trong (7.20) theo hàm riêng của toán tử $\hat{F}$:

$$\psi(x) = \sum_n c_n f_n; \ \varphi(x) = \sum_n b_n f_n,$$

thay vào (7.20)

$$\hat{A}\sum_n c_n f_n = \sum_n b_n f_n. \tag{7.23}$$

Nhân vô hướng hai vế của phương trình (7.23) về bên trái cho f_m, ta được:

$$\langle f_m|\hat{A}\sum_n c_n f_n\rangle = \langle f_m|\sum_n b_n f_n\rangle. \tag{7.24}$$

Hệ thức (7.24) có thể viết lại như sau:

$$\sum_n \langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle c_n = \sum_n b_n\langle f_m|f_n\rangle = b_m,$$

hay

$$\sum_n A_{mn}c_n = b_m, \tag{7.25}$$

trong đó A_{mn} là phần tử ma trận của toán tử $\hat{A}$ trong F- biểu diễn

$$A_{mn} = \langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle = \int_V f_m^*\hat{A}f_n dV. \tag{7.26}$$

Số các phần tử a_{mn} bằng số hàm riêng của toán tử $\hat{F}$. Như vậy, ma trận A là một ma trận vuông:

$$A \equiv (A)_{mn} \equiv (a_{mn}) \equiv ||a_{mn}|| = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{7.27}$$

Hệ thức (7.25) được viết dưới dạng khai triển của ma trận như sau:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & .... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & .... & a_{2n} \\ .... & .... & .... & .... \\ a_{m1} & a_{m2} & .... & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ .... \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ .... \\ b_m \end{pmatrix} \tag{7.28}$$

Phương trình ma trận (7.28) được viết dưới dạng ma trận thu gọn như sau:

$$AC = B, \tag{7.29}$$

trong đó C và B là các ma trận cột như đã chỉ ở (7.28).

Ta chú ý rằng dạng của ma trận A ở (7.27) được cho trong F-biểu diễn. Trong trường hợp $\hat{F} = \hat{A}$ (A-biểu diễn) thì ma trận A có dạng chéo. Thật vậy, trong A-biểu diễn khi ta thay $f_n = \alpha_n$ là hàm riêng của toán tử $\hat{A}$ thì (7.26) trở thành:

$$a_{mn} = \langle \alpha_m | \hat{A} | \alpha_n \rangle = \langle \alpha_m | a_n \alpha_n \rangle = a_n \langle \alpha_m | \alpha_n \rangle = a_n \delta_{nm} \tag{7.30}$$

vậy ma trận A có dạng chéo

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & .... & 0 \\ 0 & a_2 & .... & 0 \\ .... & .... & .... & .... \\ 0 & 0 & .... & a_m \end{pmatrix} \tag{7.31}$$

Ví dụ 3.1:

Toán tử $\hat{A}$, hàm ψ và φ được biểu diễn bằng ma trận dạng:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix}, |\psi\rangle = \begin{pmatrix} -1+\mathrm{i} \\ 3 \\ 2+3\mathrm{i} \end{pmatrix}, \langle \varphi | = \begin{pmatrix} 6 & -\mathrm{i} & 5 \end{pmatrix}.$$

(a) Hãy tính: $A|\psi\rangle$, $\langle \varphi | A | \psi \rangle$.

(b) Tìm liên hiệp Hermite của A, $|\psi\rangle$ và $\langle \varphi |$.

(c) Tính $\langle \varphi | \psi \rangle$ và $\langle \psi | \varphi \rangle$. Cho nhận xét về kết quả tính được.

Lời giải:

(a) Tính $A|\psi\rangle$ và $\langle\varphi|A|\psi\rangle$:

$$A|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1+\text{i} \\ 3 \\ 2+3\text{i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5+17i \\ 17+34i \\ 11+14i \end{pmatrix}.$$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 6 & -i & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3+2i & 3i \\ -i & 3i & 8 \\ 1-i & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1+\text{i} \\ 3 \\ 2+3\text{i} \end{pmatrix} = 59+155\text{i}.$$

(b) Tìm liên hiệp Hermite của A, $|\psi\rangle$ và $\langle\varphi|$:

$$A^\dagger = \widetilde{A^*} = \begin{pmatrix} 5 & i & 1+i \\ 3-2i & -3i & 1 \\ 3i & 8 & 4 \end{pmatrix}, |\psi\rangle^\dagger = \begin{pmatrix} -1+i & 3 & 2+3i \end{pmatrix}, \langle\varphi|^\dagger = \begin{pmatrix} 6 \\ i \\ 5 \end{pmatrix}.$$

(c) Tính $\langle\varphi|\psi\rangle$ và $\langle\psi|\varphi\rangle$:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 6 & -i & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1+i \\ 3 \\ 2+3i \end{pmatrix} = 6(-1+i)+(-i)(3)+5(2+3i) = 4+18i,$$

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} -1-i & 3 & 2-3i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 \\ i \\ 5 \end{pmatrix} = 6(-1+i)+(i)(3)+5(2-3i) = 4-18i$$

Ta thấy rằng $\langle\varphi|\psi\rangle$ và $\langle\psi|\varphi\rangle$ không bằng nhau, chúng là liên hiệp phức của nhau:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* = 4-18i.$$

3.2 TRƯỜNG HỢP TOÁN TỬ $\hat{F}$ CÓ PHỔ TRỊ RIÊNG LIÊN TỤC

Khi $\hat{F}$ có phổ trị riêng liên tục thì phương trình trị riêng của $\hat{F}$ là:

$$\hat{F}\psi_f(x) = F\psi_f(x)$$

Khai triển của hàm $\psi(x)$ và $\varphi(x)$ trong (7.20) được viết dưới dạng tích phân:

$$\psi(x) = \int_f c_f \psi_f(x) df \quad \text{và} \quad \varphi(x) = \int_f b_f \psi_f(x) df,$$

thay hai khai triển này vào (7.20), ta được:

$$\hat{A} \int_f c_f \psi_f(x) df = \int_f b_f \psi_f(x) df.$$

Nhân vô hướng hai vế của phương trình trên cho $\langle \psi_{f'}|$:

$$\int_f \langle \psi_{f'}|\hat{A}|\psi_f\rangle c_f df = \int_f b_f \langle \psi_{f'}|\psi_f\rangle df,$$

hay

$$\int_f A_{ff'} c_f df = b_{f'}, \tag{7.32}$$

trong đó

$$A_{ff'} = \langle \psi_{f'}|\hat{A}|\psi_f\rangle \tag{7.33}$$

là phần tử ma trận của toán tử $\hat{A}$ trong F-biểu diễn.

Ví dụ 3.2:

Tìm dạng của toán tử $\hat{x}$ và $\hat{p_x}$ trong p-biểu diễn.

Lời giải:

Vì $\hat{p}$ có trị riêng liên tục nên ta áp dụng công thức (7.33) để tìm phần tử ma trận của $\hat{x}$ và $\hat{p}$:

$$x_{pp'} = \langle \psi_{p'}|\hat{x}\psi_p\rangle. \tag{7.34}$$

Ta đã biết hàm riêng của toán tử $\hat{P}$ (trường hợp một chiều theo trục x) là:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad \text{với } p_x = p.$$

Thay hàm này vào hệ thức (7.34) với để ý rằng $\hat{x} = x$, ta được:

$$x_{p'p} = \langle \psi_{p'} x|\psi_p\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'x/\hbar} x e^{-ipx/\hbar} dx.$$

Nếu để ý đến hệ thức

$$xe^{ipx/\hbar} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}e^{ixp/\hbar},$$

ta được

$$\begin{aligned} x_{p'p} &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'x/\hbar}\Big(\frac{\hbar}{i}\Big)\frac{\partial}{\partial p}e^{ipx/\hbar}dx \\ &= \Big(\frac{\hbar}{i}\Big)\frac{\partial}{\partial p}\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'x/\hbar}e^{ipx/\hbar}dx \\ &= \Big(\frac{\hbar}{i}\Big)\frac{\partial}{\partial p}\delta(p'-p). \end{aligned}$$

Như vậy phần tử ma trận của toán tử $\hat{x}$ trong p-biểu diễn là:

$$x_{p'p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\delta(p'-p). \qquad (7.35)$$

Theo hệ thức (7.32) ta có:

$$b_{p'} = \int_p x_{p'p}c_p dp = -i\hbar\int_p \frac{\partial}{\partial p}\delta(p'-p)c_p dp.$$

Thực hiện phép tính tích phân từng phần và lưu ý đến điều kiện giới nội của hàm sóng, ta được:

$$b_p = i\hbar\frac{d}{dx}c_p \Leftrightarrow b_p = \hat{x}c_p.$$

Như vậy, dạng của toán tử tọa độ trong p-biểu diễn là:

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}. \qquad (7.36)$$

Tương tự, áp dụng công thức (7.33) ta tìm được dạng của toán tử $\hat{p}$ trong p-biểu diễn:

$$p_{p'p} = \langle\psi_{p'}|\hat{p}\psi_p\rangle = p\langle\psi_{p'}|\psi_p\rangle = p\delta(p'-p).$$

Từ (7.32), ta được:

$$b_{p'} = \int p_{p'p}c_p dp = \int p\delta(p'-p)c_p dp = pc_{p'}$$

so sánh với

$$b_p = pc_p,$$

ta được:

$$b_p = \hat{p} c_p.$$

Như vậy, dạng của toán tử xung lượng $\hat{p}$ trong xung lượng biểu diễn là $\hat{p} = p$.

§ 4 TRỊ TRUNG BÌNH CỦA MỘT ĐẠI LƯỢNG ĐỘNG LỰC DƯỚI DẠNG MA TRẬN

Ta đã biết trong x-biểu diễn, trị trung bình của 1 đại lượng động lực A được cho bởi hệ thức:

$$\bar{A} = \langle \psi(x) | \hat{A} \psi(x) \rangle. \tag{7.37}$$

Bây giờ ta chuyển hệ thức này sang biểu diễn của một toán tử $\hat{F}$ bất kỳ. Ta khai triển hàm $\psi(x)$ trong (7.37) theo các hàm riêng của toán tử $\hat{F}$ và giả sử xét trường hợp $\hat{F}$ có phổ trị riêng gián đoạn:

$$\psi = \sum_n c_n f_n; \quad \psi^* = \sum_m c_m^* f_m^*.$$

Thay vào (7.37), ta được:

$$\bar{A} = \sum_{n,m} \langle c_m f_m | \hat{A} | c_n f_n \rangle = \sum_{n,m} c_m^* \langle f_m | \hat{A} | f_n \rangle c_n,$$

hay:

$$\bar{A} = \sum_{n,m} c_m^* A_{mn} c_n. \tag{7.38}$$

Như vậy, biểu thức của trị trung bình của đại lượng động lực A trong F-biểu diễn là một hệ thức ma trận, trong đó A_{mn} tuân theo hệ thức (7.26) còn c_n là phần tử của ma trận cột. Hệ thức (7.38) có thể viết lại như sau:

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & .... & c_m^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & .... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & .... & a_{2n} \\ .... & .... & .... & .... \\ a_{m1} & a_{m2} & .... & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ .... \\ c_n \end{pmatrix}. \tag{7.39}$$

Hay viết dưới dạng tổng quát:

$$\bar{A} = C^{+}AC, \tag{7.40}$$

trong đó C^{+} là ma trận liên hợp Hermite của ma trận C.

§ 5 PHƯƠNG TRÌNH TRỊ RIÊNG CỦA TOÁN TỬ DƯỚI DẠNG MA TRẬN

Ta xét trường hợp $\hat{A}$ có trị riêng liên tục với phương trình trị riêng:

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a. \tag{7.41}$$

Ta tìm dạng của phương trình này trong F-biểu diễn (giả sử F có phổ gián đoạn). Khai triển hàm ψ_a theo hàm riêng của toán tử f_n của toán tử $\hat{F}$:

$$\psi_a = \sum_n c_n f_n,$$

thay vào (7.41), ta được:

$$\hat{A}\sum_n c_n f_n = a\sum_n c_n f_n.$$

Nhân vô hướng hai vế phương trình này cho $\langle f_m|$ ta được:

$$\langle f_m|\hat{A}\sum_n c_n f_n\rangle = \langle f_m|\sum_n a c_n f_n\rangle,$$

hay

$$\sum_n \langle f_m|\hat{A}f_n\rangle c_n = \sum_n a\langle f_m|f_n\rangle c_n = \sum_n a\delta_{mn}c_n = ac_m.$$

Từ đó ta được phương trình

$$\sum_n a_{nm}c_n = ac_m. \tag{7.42}$$

Hệ thức (7.42) viết dưới dạng ma trận như sau:

$$AC = aC, \tag{7.43}$$

hay:

$$\sum_n (a_{mn} - a\delta_{mn})c_n = 0. \tag{7.44}$$

Điều kiện để hệ phương trình này có nghiệm không tầm thường là:

$$\det(a_{mn} - a\delta_{mn}) = 0. \tag{7.45}$$

Dạng định thức của phương trình (7.45) là:

$$\begin{vmatrix} a_{11} - a & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - a & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} - a \end{vmatrix} = 0.$$

Đây là phương trình đặc trưng hoặc phương trình thế kỷ. Giải phương trình này ta được N các trị riêng $a_1, a_2, a_3...a_N$. Tập hợp các trị riêng này được gọi là phổ trị riêng của toán tử $\hat{A}$. Phương trình này cho ta xác định trị riêng và hàm riêng của toán tử $\hat{A}$ cho dưới dạng ma trận.

Ví dụ 5.1:

Ví dụ: Tìm trị riêng và hàm riêng của toán tử $\hat{A}$ cho dưới dạng ma trận như sau:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Áp dụng phương trình (7.45) ta được:

$$A = \begin{vmatrix} 0 - a & 1 \\ 1 & 0 - a \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow a^2 = 1 \Rightarrow a = \pm 1.$$

Như vậy trị riêng của $\hat{A}$ là ± 1.

Bây giờ ta tìm hàm riêng của $\hat{A}$. Thay các giá trị của a vào phương trình (7.43), ta được:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \pm 1 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Như vậy:

+ Khi $a = 1$ thì $c_1 = c_2 = \alpha$, hàm riêng là một ma trận cột có dạng: $C = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

+ Khi $a = -1$ thì $c_1 = -c_2 = -\alpha$, hàm riêng là: $C = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, trong đó $\alpha =$ const.

§ 6 DẠNG MA TRẬN CỦA PHƯƠNG TRÌNH SCHRODINGER

Ta đã biết dạng của phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian trong x-biểu diễn là

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t). \tag{7.46}$$

Bây giờ ta chuyển phương trình này sang F-biểu diễn. Muốn vậy, ta khai triển hàm $\Psi(x,t)$ trong (7.46) theo hàm riêng của toán tử $\hat{F}$ (giả sử F có giá trị gián đoạn):

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n(t) f_n(x),$$

thay vào (7.46), ta được

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n(t) f_n(x) = \hat{H}\sum_n c_n(t) f_n(x).$$

Nhân vô hướng phương trình này cho $\langle f_m(x)|$ ta được:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n c_n(t)\langle f_m(x)|f_n(x)\rangle = \sum_n \langle f_m(x)|\hat{H}|f_n(x)\rangle c_n(t),$$

hay:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_m(t) = \sum_n H_{mn}c_n(t). \tag{7.47}$$

Phương trình (7.47) có thể viết dạng tổng quát:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}C(t) = HC(t), \tag{7.48}$$

trong đó các phần tử của ma trận H là

$$H_{mn} = \langle f_m(x)|\hat{H}|f_n(x)\rangle. \tag{7.49}$$

Nếu xét trong E-biểu diễn ($\hat{F} = \hat{H}$) thì trong phần tử ma trận H_{mn} ở (7.49) ta thay hàm riêng f_n của toán tử $\hat{F}$ bằng hàm riêng ψ_{E_n} của toán tử năng lượng $\hat{H}$:

$$H_{mn} = \langle \psi_{Em}(x)|E_n\psi_{En}(x)\rangle = E_n\delta_{mn}.$$

Thay phần tử ma trận H_{mn} vào (7.47) ta được:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_m(t) = \sum_n E_n\delta_{mn}c_n(t) = E_m c_m(t). \tag{7.50}$$

Từ (7.54), ta tìm được hệ số $c_m(t)$

$$c_m(t) = c_m(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}.$$

Biểu thức này có dạng tương tự như nghiệm của phương trình Schrodinger ở trạng thái dừng trong x-biểu diễn:

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x,0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}.$$

Ví dụ 6.1:

Tìm dạng của phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian của hạt tự do trong p-biểu diễn và giải phương trình đó.

Lời giải:

Sử dụng phương trình (7.46), trong đó toán tử Hamilton của hạt tự do là

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

Khai triển hàm $\Psi(x,t)$ theo hàm riêng của toán tử xung lượng

$$\Psi(x,t) = \int\limits_p c_p(t)\psi_p(x)dp,$$

thay vào phương trình (7.46)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_p c_p(t) < \psi_{p'}|\psi_p(x) > dp =< \psi_{p'}|\hat{H}\int\limits_p c_p(t)\psi_p(x)dp >,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_p c_p(t)\delta(p'-p)dp = \int\limits_p < \psi_{p'}|\hat{H}|\psi_p > c_p dp,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_{p'}(t) = \int\limits_p H_{p'p}c_p(t)dp. \tag{7.51}$$

Ta tính phần tử ma trận $H_{p'p}$:

$$\begin{aligned} H_{p'p} =< \psi_{p'}|\hat{H}|\psi_p >&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2}{dx^2}e^{\frac{i}{\hbar}px}dx = ... \\ &= \frac{p^2}{2m}\frac{1}{2\pi\hbar}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}p'x}e^{\frac{i}{\hbar}px}dx = \frac{p^2}{2m}\delta(p'-p), \end{aligned} \tag{7.52}$$

thay vào phương trình (7.51), ta được:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_{p'} = \int_p \frac{p^2}{2m}c_p\delta(p'-p)dp = \frac{p'^2}{2m}c_{p'}.$$

Cuối cùng, ta được:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_p = \frac{p^2}{2m}c_p, \tag{7.53}$$

giải phương trình này ta được:

$$c_p(t) = e^{-ip^2t/2m\hbar}c_p(0).$$

§ 7 DẠNG MA TRẬN CỦA PHƯƠNG TRÌNH HEISENBERG

Ta đã biết dạng của phương trình Heisenberg trong x-biểu diễn là:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}].$$

Bây giờ ta tìm dạng của phương trình này trong F-biểu diễn (xét trường hợp phổ trị riêng của $\hat{F}$ là gián đoạn).

Từ biểu thức của trị trung bình của đại lượng A dưới dạng ma trận:

$$\bar{A} = \sum_{n,m} c_m^* A_{mn} c_n,$$

ta lấy đạo hàm biểu thức này theo thời gian:

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \sum_{n,m} c_m^* \frac{\partial A_{mn}}{\partial t} c_n + \sum_{n,m} \frac{\partial c_m^*}{\partial t} A_{mn} c_n + \sum_{n,m} c_m^* A_{mn} \frac{\partial c_n}{\partial t}. \tag{7.54}$$

Theo (7.47) thì:

$$\frac{\partial c_n}{\partial t} = (1/i\hbar) \sum_k H_{nk} c_k; \frac{\partial c_m^*}{\partial t} = (-1/i\hbar) \sum_k (H_{mk} c_k)^*,$$

thay vào (7.54), ta được:

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \sum_{n,m} \left(c_m^* \frac{\partial A_{mn}}{\partial t} c_n + \frac{i}{\hbar} \sum_k (H_{mk} c_k)^* A_{mn} c_n - \frac{i}{\hbar} \sum_k c_m^* A_{mn} H_{nk} c_k \right). \tag{7.55}$$

Tổng thứ hai trong ngoặc (...) của (7.55) có thể viết lại như sau:

$$\sum_{n,m,k} (H_{mk} c_k)^* A_{mn} c_n = \sum_{n,m,k} c_k^* H_{km} A_{mn} c_n.$$

Nếu hoán vị hai chỉ số k và m thì:

$$\sum_{n,m,k} c_k^* H_{km} A_{mn} c_n = \sum_{n,m,k} c_m^* H_{mk} A_{kn} c_n.$$

Tổng thứ ba trong ngoặc (...) của (7.55) có thể viết khi hoán vị hai chỉ số k và n

$$\sum_{n,m,k} c_m^* A_{mn} H_{nk} c_k = \sum_{n,m.k} c_m^* A_{mk} H_{kn} c_n.$$

Như vậy (7.55) có thể viết lại như sau:

$$\frac{d}{dt}\bar{A} = \sum_{n,m} \left(c_m^* \left\{ \frac{\partial A_{mn}}{\partial t} c_n + \frac{i}{\hbar} \sum_k (H_{mk} A_{kn} - A_{mk} H_{kn} \right\} c_n \right),$$

hay:

$$\frac{d}{dt}\bar{A} = \sum_{n,m}\left(c_m^*\left\{\frac{\partial A_{mn}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}(HA - AH)_{mn}\right\}c_n\right),$$

trong đó $\sum_k H_{mk}A_{kn} = (HA)_{mn}$.

Như vậy

$$\frac{d}{dt}\bar{A} = \sum_{n,m} c_m^*\left\{\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H, A]\right\}_{mn} c_n.$$

Mặt khác, áp dụng công thức

$$\frac{d}{dt}\bar{A} = \overline{\frac{dA}{dt}},$$

trong đó

$$\overline{\frac{dA}{dt}} = \sum_{n,m} c_m^*\left(\frac{dA}{dt}\right)_{mn} c_n.$$

Từ đây ta có thể suy ra biểu thức của đạo hàm của toán tử $\hat{A}$ dưới dạng ma trận

$$\left(\frac{dA}{dt}\right)_{mn} = \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_{mn} + \frac{i}{\hbar}[H, A)]_{mn}. \quad (7.56)$$

Ta khảo sát một trường hợp riêng quan trọng khi xét dạng của phương trình (7.56) trong E-biểu diễn. Lúc đó các phần tử ma trận của toán tử $\hat{A}$ là:

$$H_{kn} = E_k\delta_{kn}; H_{mn} = E_m\delta_{mk},$$

thay vào (7.56) và giả sử toán tử $\hat{A}$ không phụ thuộc tường minh vào thời gian:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{dA}{dt}\right)_{mn} &= \frac{i}{\hbar}[H, A)]_{mn} = \frac{i}{\hbar}\sum_k (H_{mk}A_{kn} - A_{mk}H_{kn}) \\
&= \frac{i}{\hbar}\sum_k (E_m\delta_{mk}A_{kn} - A_{mk}E_k\delta_{kn}) \\
&= \frac{i}{\hbar}(E_mA_{mn} - A_{mn}E_n) = \frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)A_{mn} \\
&= i\omega_{mn}A_{mn}, \quad (7.57)
\end{aligned}$$

trong đó $\omega_{mn} = \frac{(E_m - E_n)}{\hbar}$ gọi là tần số Bohr.

§ 8 SỰ CHUYỂN BIỂU DIỄN - PHÉP BIẾN ĐỔI ĐƠN NGUYÊN

8.1 SỰ CHUYỂN BIỂU DIỄN

Trong các phần trên ta đã xét trường hợp chuyển từ biểu diễn toạ độ sang một biểu diễn bất kỳ (F-biểu diễn). Bây giờ ta xét trường hợp tổng quát khi ta chuyển từ một biểu diễn bất kỳ này sang một biểu diễn bất kỳ khác, chẳng hạn F-biểu diễn sang G-biểu diễn. Ta ký hiệu hệ hàm riêng tương ứng của hai toán tử $\hat{F}$ và $\hat{G}$ là $\{f_m\}$ và $\{g_n\}$ (giả sử hai toán tử này đều có trị riêng gián đoạn). Về mặt hình học điều này có nghĩa là ta chuyển từ hệ toạ độ có các vectơ cơ sở là $\{f_m\}$ sang hệ toạ độ có vectơ cơ sở là $\{g_n\}$ trong không gian Hilbert.

Để tìm công thức cho phép chuyển biểu diễn, nghĩa là công thức cho phép biến đổi toạ độ, ta khai triển hàm g_n theo các hàm f_m:

$$g_n = \sum_m c_m f_m,$$

trong đó hệ số c_m được tính theo công thức (xem Chương III):

$$c_m = \langle f_m | g_n \rangle.$$

Đặt $S_{mn} = \langle f_m | g_n \rangle$, ta sẽ được

$$g_n = \sum_m S_{mn} f_m. \tag{7.58}$$

Ta thấy tập hợp các đại lượng S_{mn} lập thành một ma trận, gọi là ma trận biến đổi từ biểu diễn này sang biểu diễn khác. Về mặt đại số mỗi phần tử ma trận này biểu diễn một phép chiếu của hệ cơ sở f_m lên hệ cơ sở khác g_n.

Trước hết, ta xét một số tính chất của ma trận S. Từ điều kiện trực chuẩn của hệ hàm riêng của toán tử $\hat{G}$, ta có:

$$\langle g_n | g_\ell \rangle = \delta_{n\ell}. \tag{7.59}$$

Thay (7.58) vào (7.59) ta được:

$$\begin{aligned}\langle g_n|g_\ell\rangle &= \langle\sum_m S_{mn}f_m\sum_k S_{k\ell}f_k\rangle = \sum_{m,k}S^*_{mn}S_{k\ell}\langle f_m|f_k\rangle \\ &= \sum_{m,k}S^*_{mn}S_{k\ell}\delta_{mk} = \sum_k S^*_{kn}S_{k\ell} \\ &= \sum_k (S^+)_{nk}S_{k\ell} = \delta_{n\ell}. \end{aligned} \tag{7.60}$$

Viết một cách ngắn gọn dưới dạng ma trận:

$$S^+S = I, \tag{7.61}$$

trong đó I là ký hiệu của ma trận đơn vị. Trên đây, ta đã khai triển hàm g_n theo hàm f_m, bây giờ nếu tiến hành khai triển ngược lại (khai triển hàm f_m theo hàm g_n), sau đó thực hiện các phép tính tương tự, ta được:

$$SS^+ = I. \tag{7.62}$$

Như vậy, ma trận S là một ma trận unita (đơn nguyên). Vì tích của S^+ và S bằng ma trận đơn vị nên S^+ là ma trận đảo của S, nghĩa là $S^+ = S^{-1}$. Chú ý rằng ma trận unita không phải là ma trận Hermite ($S^+ = S$).

Phép chuyển từ một biểu diễn này sang một biểu diễn khác được thực hiện nhờ ma trận unita nên được gọi là phép biến đổi unita. Về mặt hình học, phép biến đổi này tương đương với một phép quay nào đó trong không gian Hilbert.

Trong trường hợp tổng quát, phép biến đổi unita của hàm ψ dựa vào toán tử unita $\hat{S}$ có thể được biểu diễn một cách tượng trưng bởi đẳng thức:

$$\Phi = \hat{S}\psi \tag{7.63}$$

Trong phép biến đổi này, hàm sóng chuyển từ biến này sang biến khác, cả các toán tử cũng đồng thời biến đổi sang các biến mới. Chẳng hạn, các hàm ψ chịu tác động của một toán tử $\hat{F}_\psi$ nào đó sao cho:

$$\psi' = \hat{F}_\psi\psi \tag{7.64}$$

Chúng ta biến đổi đẳng thức này dựa vào toán tử unita $\hat{S}$. Nếu để ý rằng $\hat{S}^{+}\hat{S} = 1$ ta sẽ có:

$$\hat{S}\psi' = \hat{S}\hat{F}_{\psi}\hat{S}^{+}\hat{S}\psi$$

nếu tính đến (7.63), ta sẽ được:

$$\Phi' = \hat{F}_{\Phi}\Phi$$

trong đó:

$$\hat{F}_{\Phi} = \hat{S}\hat{F}_{\psi}\hat{S}^{+} \tag{7.65}$$

là toán tử tác dụng lên hàm Φ. Hệ thức (7.65) xác định quy luật theo đó toán tử được biến đổi sang biến mới trong khi phép biến đổi (7.63) chuyển hàm sóng về cùng những biến đó.

Trong cơ học lượng tử có ý nghĩa nhất là các phép biến đổi có dạng $\hat{S} = e^{i\hat{\alpha}}$, trong đó $\hat{\alpha}$ là một toán tử Hermite hay một hàm thực bất kỳ của cùng biến số như hàm sóng. Phép biến đổi unita:

$$\hat{S}\psi = e^{i\hat{\alpha}}\psi$$

thay đổi dạng của các hàm sóng nhưng không thay đổi biến độc lập của hàm. Một phép biến đổi như thế được gọi là phép biến đổi pha. Như vậy, với mỗi đại lượng động lực có thể tương ứng không phải là một mà là một tập hợp vô hạn các toán tử khác nhau bởi các phép biến đổi unita. Nói cách khác các toán tử liên hệ nhau theo hệ thức:

$$\hat{A}' = SAS^{-1} \qquad \text{với } SS^{+} = 1$$

tương ứng với cùng một đại lượng động lực.

8.2 SỰ CHUYỂN BIỂU DIỄN CỦA HÀM SÓNG

Ta dễ dàng thu được mối liên hệ trực tiếp giữa các thành phần của hàm sóng ψ mô tả cùng một trạng thái trong các biểu diễn khác nhau, chẳng hạn trong F-biểu diễn và G-biểu diễn nhờ ma trận unita S.

Giả sử:

$$\psi = \sum_m c_m f_m = \sum_n c'_n g_n,$$

trong đó c_m là dạng của hàm sóng ψ trong F-biểu diễn (nghĩa là trong hệ toạ độ mà các hàm f_m là các vectơ cơ sở), còn c'_n là dạng của hàm sóng ψ trong G-biểu diễn (nghĩa là trong hệ toạ độ mà các hàm g_n là các vectơ cơ sở). Theo (7.58) ta có thể viết:

$$\psi = \sum_m c_m f_m = \sum_n c'_n \sum_m S_{mn} f_m = \sum_{n,m} c'_n S_{mn} f_m,$$

từ đó, ta được:

$$c_m = \sum_n S_{mn} c'_n, \tag{7.66}$$

trong đó các hệ số c_m và c'_n có thể biểu diễn dưới dạng các ma trận cột, vì vậy ta có thể viết lại (7.66) bằng phương trình ma trận như sau:

$$C = SC'. \tag{7.67}$$

Nếu nhân hai vế của (7.67) cho S^+ về bên trái và chú ý đến tính chất của ma trận unita ta được:

$$C' = S^+ C. \tag{7.68}$$

8.3 SỰ CHUYỂN BIỂU DIỄN CỦA TOÁN TỬ

Trong phần (3.1) ta đã biểu diễn dạng của toán tử $\hat{A}$ dưới dạng ma trận, dựa vào sự chuyển từ x-biểu diễn sang F-biểu diễn. Lúc đó toán tử $\hat{A}$ có dạng ma trận với các thành phần được biểu diễn ở (7.26). Bây giờ ta sẽ khảo sát dạng của ma trận A từ F-biểu diễn sang G-biểu diễn.

Theo (7.25) thì phương trình toán tử trong F-biểu diễn có dạng:

$$\sum_n A_{mn} c_n = b_m \Rightarrow AC = B, \quad \text{với } A_{mn} = \langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle$$

là phần tử của ma trận A trong F-biểu diễn.

Khi chuyển sang G-biểu diễn thì các ma trận B và C chuyển thành B' và C' theo hệ thức (7.67) và (7.68). Lúc đó phương trình (7.29) trở thành:

$$B = AC \Rightarrow SB' = ASC'.$$

Nhân hai vế của hệ thức trên với S^+ về bên trái ta được:

$$B' = S^+ASC' = A'C'.$$

Như vậy, trong G-biểu diễn ma trận A biến đổi thành ma trận A' được xác định bởi hệ thức sau:

$$A' = S^+AS, \tag{7.69}$$

hay viết dưới dạng khai triển theo các thành phần của ma trận:

$$(A')_{mn} = \sum_{k,\ell} (S^+)_{mk} A_{k\ell} S_{\ell n}. \tag{7.70}$$

8.4 MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA PHÉP BIẾN ĐỔI UNITA

1. *Phép biến đổi unita không làm thay đổi sự chuẩn hoá của hàm sóng*

Thật vậy, giả sử ta có

$$\psi = \sum_n c_n f_n,$$

trong đó c_n là hàm sóng trong F-biểu diễn. Điều kiện chuẩn hoá trong x-biểu diễn là $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, hay:

$$\langle \sum_m c_m f_m | \sum_n c_n f_n \rangle = 1 \Rightarrow \sum_{m,n} c_m^* c_n \langle f_m | f_n \rangle = 1,$$

từ đó ta được:

$$\sum_n c_n^* c_n = 1. \tag{7.71}$$

Mặt khác, do phép biến đổi unita nên theo (7.67) ta có thể viết:

$$c_n = \sum_m S_{nm} c'_m.$$

Vậy:

$$\begin{aligned} \sum_n c_n^* c_n &= \sum_{n,m} S_{nm}^* c'^*_m \sum_p S_{np} c'_p = \sum_{n,m,p} S_{nm}^* S_{np} c'^*_m c'_p \\ &= \sum_{n,m,p} (S^+)_{mn} S_{np} c'^*_m c'_p = \sum_{m,p} \delta_{mp} c'^*_m c'_p, \end{aligned} \tag{7.72}$$

hay

$$\sum_m c_m^* c_m = 1. \tag{7.73}$$

Ta thấy (7.73) chính là điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng trong G-biểu diễn, nó có dạng tương tư như điều kiện chuẩn hoá của hàm sóng trong F-biểu diễn (Hệ thức 7.71).

2. *Phép biến đổi unita không làm thay đổi tính chất của hệ hàm riêng của toán tử*

Giả sử trong x-biểu diễn hệ hàm riêng của toán tử $\hat{A}$ thoả mãn điều kiện trực giao:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0. \tag{7.74}$$

Bây giờ ta xét trong F-biểu diễn, muốn vậy ta khai triển hàm ψ_1 và ψ_2 theo hàm riêng của toán tử $\hat{F}$:

$$\psi_1 = \sum_m c_{1m} f_m; \qquad \psi_2 = \sum_n c_{2n} f_n,$$

thay vào (7.74) ta được:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \sum_{m,n} c_{1m}^* c_{2n} \langle f_m | f_n \rangle = \sum_m c_{1m}^* c_{2m} = 0. \tag{7.75}$$

Ta dễ dàng chứng minh rằng qua phép biến đổi đơn nguyên chuyển từ F-biểu diễn sang G-biểu diễn thì điều kiện trực giao của hàm sóng vẫn nghiệm đúng.

Thật vậy ta có:

$$c_{2m} = \sum_p S_{mp} c\,'_{2p}; \qquad c^*_{1m} = \sum_k S_{mk} c\,'^*_{1k},$$

thay vào (7.75):

$$\sum_m c^*_{1m} c_{2m} = \sum_m \sum_{p,k} S^*_{mk} S_{mp} c\,'_{2p} c\,'^*_{1k} = \sum_{p,k} \delta_{pk} c\,'_{2p} c\,'^*_{1k} = \sum_p c\,'^*_{1p} c\,'_{2p} = 0.$$

3. *Phép biến đổi unita không làm thay đổi dạng của phương trình ma trận*

Giả sử ta có phương trình ma trận:

$$C = AB. \tag{7.76}$$

Theo (7.69) ta có:

$$C\,' = S^+(AB)S = S^+ASS^+BS = A\,'B\,'. \tag{7.77}$$

Ta thấy dạng của hai phương trình (7.76) và (**??**) là như nhau.

4. *Phép biến đổi unita không làm thay đổi trị riêng của ma trận*

Giả sử trong F-biểu diễn phương trình trị riêng của toán tử $\hat{A}$ có dạng:

$$\sum_k A_{mk} c_k^{(n)} = a_n c_k^{(n)}, \tag{7.78}$$

trong đó a_n là trị riêng thứ n của toán tử $\hat{A}$; tập hợp các hệ số $c^{(n)_1}, c^{(n)_2}$...là hàm riêng của toán tử $\hat{A}$ trong F-biểu diễn thỏa mãn trị riêng thứ n. Phương trình (7.78) có thể viết dưới dạng ma trận:

$$AC^{(n)} = a_n C^{(n)}. \tag{7.79}$$

Khi chuyển sang biểu diễn mới, ma trận của toán tử $\hat{A}$ là A' có các hàm riêng là $C\,'^{(n)}$. Phương trình trị riêng bây giờ có dạng:

$$A\,'C\,'^{(n)} = a\,'_n C\,'^{(n)}. \tag{7.80}$$

Theo (7.67) và (7.68) ta có:

$$A\,' = S^{+}AS; \quad C\,'^{(n)} = S^{+}C^{n},$$

thay vào (7.80), ta được:

$$S^{+}ASS^{+}C^{(n)} = a\,'_{n}S^{+}C^{(n)}. \tag{7.81}$$

Nhân hai vế của (7.81) về bên trái cho S ta được:

$$AC^{(n)} = a\,'_{n}C^{(n)}. \tag{7.82}$$

So sánh (7.82) với (7.79), ta được: $a_n = a\,'_n$.

5. *Phép biến đổi unita không làm thay đổi vết của ma trận:*

Theo định nghĩa, vết của ma trận A là tổng các số hạng trên đường chéo

$$\mathrm{tr}A = \sum_{n} A_{nn}.$$

Ta sẽ chứng minh rằng qua phép biến đổi unita thì $\mathrm{tr}A' = \mathrm{tr}A$. Thực vậy:

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}A' &= \sum_{n} A'_{nn} = \sum_{n,\ell,k} (S^{+})_{n\ell}A_{\ell k}S_{kn} \\
&= \sum_{\ell,k} A_{\ell,k}A_{\ell k}\sum_{n} S_{kn}(S^{+}_{n\ell}) = \sum_{\ell,k} A_{\ell k}\delta_{k\ell} \\
&= \sum_{k} A_{kk} = \mathrm{tr}A.
\end{aligned}$$

§ 9 BIỂU DIỄN SCHRODINGER, BIỂU DIỄN HEISENBERG VÀ BIỂU DIỄN TƯƠNG TÁC

Ta biết rằng hàm sóng mang thông tin về hệ vi mô với ý nghĩa là muốn có thông tin về một đại lượng động lực A thì ta phải tính giá trị trung bình

$$\overline{A} = \langle\psi|\hat{A}\psi\rangle. \tag{7.83}$$

Trị trung bình $\overline{A}$ là một hàm của thời gian. Vấn đề là sự phụ thuộc thời gian này được gán cho đại lượng nào trong tích vô hướng (7.83), từ đó ta có các biểu diễn (hoặc bức tranh) khác nhau. Nếu sự sự phuộc thời gan được gán cho hàm sóng ta có biểu diễn Schrodinger. Nếu sự phụ thuộc thời gian được gán cho toán tử ta sẽ có bức tranh Heisenberg, trong lúc đó đối với bức tranh tương tác sự phụ thuộc thời được chia cho cả hàm sóng và toán tử.

9.1 BIỂU DIỄN SCHRODINGER

Trong trường hợp phổ trị riêng của toán tử không phụ thuộc thời gian thì dạng toán học của toán tử không phụ thuộc thời gian. Lúc này sự biến thiên của trị trung bình theo thời gian được xác định bởi sự thay đổi theo thời gian của hàm trạng thái. Biểu diễn loại này được gọi là biểu diễn Schrodinger, trong đó sự biến thiên của hàm sóng theo thời gian được xác định bởi phương trình Schrodinger phụ thuộc thời gian:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t). \tag{7.84}$$

Hàm sóng thay đổi theo thời gian được mô tả bởi phương trình

$$\Psi(x,t) = \hat{S}(t)\psi(x), \tag{7.85}$$

trong đó $\psi(x)$ là hàm sóng tại thời điểm $t = 0$. Toán tử $\hat{S}(t)$ được gọi là ma trận S (ma trận tán xạ) hay toán tử tiến hóa theo thời gian (time evolution operator). Để xác định dạng của toán tử $\hat{S}(t)$ ta thay hàm sóng (7.85) vào phương trình Schrodinger (7.84):

$$i\hbar\frac{\partial\hat{S}(t)}{\partial t}\psi(x) = \hat{H}\hat{S}(t)\psi(x),$$

hay:

$$\left[i\hbar\frac{\partial\hat{S}(t)}{\partial t} - \hat{H}\hat{S}(t)\right]\psi(x) = 0.$$

Ta được phương trình vi phân cho toán tử $\hat{S}(t)$

$$i\hbar\frac{\partial\hat{S}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{S}(t). \tag{7.86}$$

Nếu $\hat{H}$ không phụ thuộc tường minh vào thời gian thì nghiệm hình thức của phương trình (7.86) là:

$$\hat{S}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \tag{7.87}$$

Như vậy, sự biến thiên của trạng thái theo thời gian, theo (7.85) được xác định bởi hàm sóng:

$$\Psi(x,t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\psi(x). \tag{7.88}$$

Đặc điểm của biểu thức (7.88) là có chứa toán tử ở hàm mũ. Để xác định tác dụng của một toán tử như thế lên hàm $\psi(x)$ ta phải khai triển hàm e mũ theo dạng chuỗi, đồng thời khai triển hàm $\psi(x)$ theo các hàm riêng φ_n của toán tử $\hat{H}$, ứng với phương trình trị riêng: $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$:

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^k}{k!}\sum_n c_n\varphi_n = \sum_n c_n\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varphi_n t\right)^k}{k!} \\
&= \sum_n c_n\varphi_n\sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)^k\frac{1}{k!} = \sum_n c_n\varphi_n e^{\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)}
\end{aligned} \tag{7.89}$$

9.2 BIỂU DIỄN HEISENBERG

Trong biểu diễn này hàm sóng không thay đổi theo thời gian, trong lúc đó toán tử lại thay đổi theo thời gian. Giả sử $\Psi(x,t)$ là hàm sóng trong biểu diễn Schrodinger, còn $\psi_H(x)$ là hàm sóng không phụ thuộc thời gian trong biểu diễn Heisenberg, khi đó theo (7.85) sự chuyển từ biểu diễn Schrodinger sang biểu diễn Heisenberg được thực hiện nhờ phép biến đổi:

$$\psi_H(x) = \hat{S}^{-1}(t)\Psi_S(x,t) \tag{7.90}$$

trong đó $\hat{S}(t)$ là toán tử dạng (7.87). Nếu khi chuyển từ biểu diễn Schrodinger sang biểu diễn Heisenberg các hàm sóng biến đổi theo (7.90) thì theo quy tắc (7.63) và (7.65) của phép biến đổi unita, ta cần phải đồng thời biến đổi các toán tử theo quy luật:

$$\hat{F}_H(t) = S^{-1}(t) F_S \hat{S}(t) \tag{7.91}$$

Như vậy, nếu trong biểu diễn Schrodinger toán tử không phụ thuộc thời gian thì trong biểu diễn Heisenberg chúng phụ thuộc vào thời gian theo quy luật(7.91), trong lúc đó hàm sóng không phụ thuộc thời gian. Vì $S(0) = S^{-1}(0) = 1$ nên hàm sóng trong biểu diễn Schrodinger và biểu diễn Heisenberg trùng nhau tại thời điểm $t = 0$. Các toán tử trong cả hai biểu diễn cũng trùng nhau tại thời điểm này. Vì $F_H(0) = F_S$ nên phương trình (7.91) sẽ xác định sự biến thiên của toán tử trong biểu diễn Heisenberg sau thời gian t.

9.3 BIỂU DIỄN TƯƠNG TÁC

Nếu toán tử Hamilton của một hệ lượng tử có thể được viết dưới dạng tổng của hai số hạng:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{7.92}$$

trong đó $\hat{H}_0$ là toán tử Hamilton khi không tính đến tương tác giữa các phần của hệ, $\hat{V}$ là toán tử tương tác. Để mô tả sự biến thiên trạng thái theo thời gian đối với hệ loại này ta thường dùng biểu diễn tương tác. Việc chuyển từ hàm sóng $\Psi_S(x,t)$ của biểu diễn Schrodinger sang hàm sóng của biểu diễn tương tác $\Psi_I(x,t)$ được thực hiện bởi toán tử unita:

$$\hat{S}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right).$$

Do đó:

$$\Psi_I(x,t) = \hat{S}(t)\Psi_S(x,t). \tag{7.93}$$

Nếu thay vào phương trình Schrodinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_S(x,t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi_S(x,t)$$

hàm

$$\Psi_S(x,t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\Psi_I(x,t),$$

ta được phương trình Schrodinger trong biểu diễn tương tác:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_I(x,t)}{\partial t} = \hat{V}_I\Psi_I(x,t), \tag{7.94}$$

trong đó:

$$\hat{V}_I = \hat{S}(t)\hat{V}S^+(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\hat{V}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right). \tag{7.95}$$

Tất cả các toán tử trong biểu diễn tương tác thay đổi theo thời gian theo cách mà nếu $\hat{A}$ là toán tử trong biểu diễn Schrodinger thì toán tử trong biểu diễn tương tác được cho bởi:

$$\hat{A}_I = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t\right). \tag{7.96}$$

Như vậy, trong biểu diễn tương tác sự thay đổi của trạng thái theo thời gian được mô tả bởi sự thay đổi theo thời gian của cả hàm sóng và toán tử. Sự phụ thuộc thời gian của toán tử tuân theo quy luật (7.96) hay theo phương trình tương đương với nó:

$$\frac{d\hat{A}_I}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{A}_I, \hat{H}_0]. \tag{7.97}$$

Phương trình này cũng có thể tìm được bằng cách lấy đạo hàm theo thời gian biểu thức (7.96). Sự thay đổi của hàm sóng theo thời gian được xác định bởi phương trình (7.94). Phương trình này có dạng của phương trình Schrodinger, nhưng toán tử Hamilton toàn phần của hệ được thay bằng toán tử tương tác.

Biểu diễn tương tác là biểu diễn trung gian giữa biểu diễn Schrodinger và biểu diễn Heisenberg. Các toán tử trong biểu diễn này phụ thuộc vào thời gian giống như toán tử của biểu diễn Heisenberg đối với hệ có toán tử $\hat{H}_0$, sự biến

thiên theo thời gian của hàm trạng thái trong biểu diễn tương tác chỉ do toán tử tương tác quyết định.

Ngoài các ba biểu diễn đã được trình bày ở trên, còn có những phương pháp khác để mô tả sự thay đổi của hệ lượng tử theo thời gian, chẳng hạn như *biểu diễn lượng tử hoá lần thứ hai* và *biểu diễn số lấp đầy*.

§ 10 TÓM TẮT CHƯƠNG 7

- Cách biểu diễn trạng thái của một hệ lượng tử bằng hàm sóng phụ thuộc tọa độ dược gọi là x-biểu diễn. Tuy nhiên, biểu diễn này không phải là duy nhất mà còn có các cách biểu diễn khác. Nói chung, nếu hàm sóng phụ thuộc vào một biến số ứng với một đại lượng động lực F nào đó thì ta nói hàm sóng được viết trong F-biểu diễn: $\varphi = \varphi(F)$.

- Trong lý thuyết biểu diễn, toán tử được biểu diễn bằng ma trận vuông, hàm sóng được biểu diễn bằng ma trận cột. Dang của phương trình Schrodinger, phương trình Heisenberg, phương trình trị riêng...đều tương tự như trong x-biểu diễn nhưng đều có dạng ma trận.

- Việc chuyển từ một biểu diễn này sang một biểu diễn khác được thực hiện bằng phép biến đổi đơn nguyên. Nhờ phép biến đổi này, ta có thể chuyển dạng của hàm sóng và toán tử qua các biểu diễn khác nhau.

- Sự thay đổi theo thời gian của trị trung bình của một đại lượng động lực được gán cho hàm sóng (biểu diễn Schrodinger), hoặc toán tử (biểu diễn Heisenberg), hoặc cả hàm sóng, cả toán tử (biểu diễn tương tác).

§ 11 BÀI TẬP CHƯƠNG 7

1. Dựa vào biểu thức của phần tử ma trận của toán tử Â trong F- biểu diễn:

$$A_{mn} = \langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle.$$

Chứng minh rằng nếu Â là toán tử Hermite thì ma trận biểu diễn toán tử Â cũng là ma trận Hermite.

2. Tìm các ma trận của toạ độ và xung lượng trong E-biểu diễn đối với hạt chuyển động trong giếng thế một chiều sâu vô hạn có bề rộng L.

3. Trong x biểu diễn, hàm sóng của hạt có dạng:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x}, & \text{khi } -a/2 \le x \le a/2 \\ 0, & \text{khi } |x| > a/2. \end{cases}$$

Tìm dạng của hàm sóng này trong biểu diễn xung lượng.

4. Trạng thái của 1 hạt được mô tả bởi hàm sóng:

$$\psi(x) = A \exp\left(-\alpha x^2 + \frac{i}{\hbar}p_0 x\right).$$

Tìm hệ số A và tìm dạng của hàm sóng trong p-biểu diễn.

5. Hàm sóng của dao động tử điều hoà ở trạng thái cơ bản có dạng:

$$\psi(x) = \left(\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2}, \text{ trong đó } \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}.$$

Tìm dạng của hàm sóng trong p-biểu diễn.

6. Trạng thái của hệ được mô tả bởi hàm sóng: $\psi(\varphi) = A\cos^2\varphi$. Hãy chuyển hàm sóng này sang L_z- biểu diễn.

7. Tìm hàm sóng chuẩn hóa trong biểu diễn xung lượng của một hạt tích điện q chuyển động trong điện trường đều có cường độ ε và hướng theo trục x.

8. Giải bài toán dao động tử điều hòa 1 chiều trong biểu diễn xung lượng. Cho rằng nghiệm của bài toán này trong biểu diễn tọa độ là đã biết.

9. Trong x-biểu diễn, hàm sóng của electrontrong nguyên tử Hydro ở trạng tháicơ bản có dạng:
$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}.$$
Hãy tìm dạng của hàm sóng trong biễu diễn xung lượng.

10. Tìm trị riêng và hàm riêng chuẩn hóa của ma trận:
$$A = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix}.$$

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. Ta chứng minh rằng nếu $\hat{A} = \hat{A}^{+}$ thì $A_{nm} = A^{+}_{nm} = (A_{mn})^{*}$.
Dựa vào biểu thức định nghĩa của phần tử ma trận của toán tử Â trong F-biểu diễn $A_{mn} = \langle\psi_m(F)|\hat{A}|\psi_n(F)\rangle$.
Do tính chất Hermitic của $\hat{A}$ và lấy liên hiệp phức hai vế của biểu thức trên, ta được:
$$(A_{mn})^{*} = \langle\psi_m(F)|\hat{A}|\psi_n(F)|\rangle^{*} = \langle\psi_n(F)|\hat{A}|\psi_m(F)\rangle = A_{nm}.$$
Như vậy, ma trận $(A)_{mn}$ là ma trận Hermite.

2. Trong E-biểu diễn, các phần tử ma trận của toạ độ và xung lượng của dạng:
$$x_{nm} = \langle\psi_n(x)|x|\psi_m(x)\rangle \text{ và } P_{nm} = \langle\psi_n(x)|\hat{p}_x|\psi_m(x)\rangle,$$
trong đó: $\psi_n(x) = \sqrt{(2/L)}\sin(n\pi x/L)$; $\psi_m(x) = \sqrt{(2/L)}\sin(m\pi x/L)$
a) $x_{nm} = \langle\psi_n(x)|x|\psi_m(x)\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x\sin\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{m\pi x}{L}dx$, tính ra ta được:
$$x_{nm} = \frac{4L_{nm}}{\pi^2(n^2-m^2)^2}[(-1)^{n-m}-1];\quad \text{với } n \neq m.$$

Trong biểu thức trên ta để ý rằng:

$$\cos(n-m)\pi = (-1)^{n-m},\ \cos(n+m)\pi = (-1)^{n+m},$$

nếu khi m = n thì $x_{nm} = L/2$.
b) $p_{nm} = \langle\psi_n(x)|\hat{p}_x|\psi_m(x)\rangle = \frac{-2i\hbar}{L}\int_0^L \sin\frac{n\pi x}{L}\frac{d}{dx}\sin\frac{m\pi x}{L}dx$, tính ra ta được:

$$p_{nm} = \frac{2i\hbar nm}{L}\frac{1}{(n^2-m^2)}[(-1)^{n-m}-1],$$

khi n=m thì $P_{nm} = 0$.

3. Trong p-biểu diễn, hàm sóng có dạng: $\varphi(p) = \langle\psi_p(x)|\psi(x)\rangle$, trong đó

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_x.x}$$

là hàm riêng của toán tử $\hat{p}_x$. Thay dạng của $\psi_p(x)$ và của $\psi(x)$ vào tích vô hướng trên ta được biểu thức của hàm sóng trong p-biểu diễn:

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar a}}\int_{-a/2}^{a/2} e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x}dx,$$

tính ra, ta được:

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a}}\sin\frac{p_0-p}{2\hbar}/(p_0-p).$$

4. Dạng của hàm sóng trong x-biểu diễn:

$$\psi(x) = A\exp(-\alpha x^2 + \frac{i}{\hbar}p_0x).$$

Sử dụng điều kiện chuẩn hoá ta tìm được hệ số $A = \sqrt{(2\alpha/\pi)}$.
Tương tự như Bài 3, hàm sóng trong p-biểu diễn có dạng:

$$\varphi(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\{\alpha x^2 + \frac{i}{\hbar}(p-p_0)x\}}dx.$$

Trong tích phân trên, ta phải biến đổi các số hạng trong dấu {...} của hàm mũ để có thể áp dụng được tích phân Poisson. Muốn vậy, ta đặt biểu thức

trong dấu {...} là Q(x) với:

$$\begin{aligned} Q(x) &= \alpha x^2 + (i/\hbar)(p-p_0)x = \alpha[x^2 + (i/\alpha\hbar)(p-p_0)x] \\ &= ..... = \alpha[x + (i/2\alpha\hbar)(p-p_0)]^2 + \frac{(p-p_0)^2}{(4\alpha\hbar^2)}, \end{aligned}$$

thay vào biểu thức của $\varphi(p)$

$$\varphi(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\alpha\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha[x+\frac{i}{2\alpha\hbar}(p-p_0)]^2} dx,$$

tính ra ta được: $\varphi(p) = \dfrac{1}{2\pi\alpha\hbar^2} \exp\left\{-\dfrac{(p-p_0)^2}{4\alpha\hbar^2}\right\}$.

5. Dạng của hàm sóng trong x-biểu diễn:

$$\psi(x) = A\exp(-\alpha^2 x^2), \quad \text{với} \quad A = \left(\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}\right)^{1/2}.$$

Tương tự như bài trước, hàm sóng trong p-biểu diễn có dạng:

$$\varphi(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[\alpha^2 x^2 + \frac{i}{\hbar}px]} dx.$$

Nếu đặt: $\beta = ip/2\alpha\hbar$, ta biến đổi tích phân này về dạng:.

$$\varphi(p) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\alpha x^2 + \beta)^2} dx.$$

Từ đó, áp dụng tích phân Poisson, ta được:

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{\alpha\hbar\sqrt{2\pi}}} \exp\left(-\frac{p^2}{4\hbar^2\alpha^2}\right).$$

6. a) Chuẩn hoá để tìm A, ta được: $A = 2/\sqrt{3\pi}$.
b) Trong L_z-biểu diễn hàm sóng có dạng: $\Phi_{Lz}(\phi) = \langle\psi_m(\phi)|\psi(\phi)\rangle$.
Thay dạng của hàm $\psi(\phi)$ và dạng của hàm riêng của toán tử $\hat{L}_z$ vào biểu thức trên, ta được:

$$\Phi_{Lz}(\phi) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \cos^2\phi . e^{im\phi} d\phi,$$

khai triển $\cos\phi$ theo hàm e mũ, rồi thay vào tích phân trên ta được:

$$\Phi_{Lz}(\phi) = \frac{A}{4\sqrt{2\pi}}\int_0^{2\pi}[2e^{i(0-m)\phi} + e^{i(2-m)\phi} + e^{i(-2-m)\phi}]d\phi.$$

Dùng điều kiện trực chuẩn của hàm riêng của toán tử $\hat{L_z}$, ta tìm được:

$$\Phi_{Lz}(\phi) = \sqrt{\frac{2}{3}}[\delta_{m,0} + \frac{1}{2}(\delta_{m,2} + \delta_{m,-2})].$$

7. Vì trong p-biểu diễn toán tử tọa độ và xung lượng có dạng:

$$\hat{x} = i\hbar\frac{d}{dp}, \quad \hat{p} = p,$$

nên toán tử Hamilton có dạng:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - i\hbar F\frac{d}{dp},$$

trong đó ta đã thay toán tử thế năng $\hat{U} = -F\hat{x}$, với $F = q\varepsilon$ là lực tác dụng của điện trường lên hạt tích điện q.
Trong biểu diễn xung lượng, phương trình Schrodinger có dạng:

$$\hat{H}\varphi(p) = E\varphi(p).$$

Nghiệm của phương trình là:

$$\varphi_E(p) = C\exp\{(i/Fh)(Ep - p^3/6m)\},$$

trong đó hệ số C tìm được từ điều kiện chuẩn hóa:

$$\int_{-vc}^{\infty}\phi^*_{E'}(p)\varphi_E(p)dp = \delta(E' - E) \Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi F\hbar}}.$$

8. Trong p-biểu diễn, Hamiltonian của dao động tử điều hòa có dạng:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(-\hbar^2\frac{d^2}{dp^2})$$

nên phương trình Schrodinger trở thành:

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p) - \frac{m\hbar\omega^2}{2}\frac{d^2\varphi(p)}{dp^2} - E\varphi(p) = 0.$$

Đặt $z = p/p_0$ với $p_0 = \sqrt{m\hbar\omega}$, ta có thể biến đổi phương trình trên về dạng:

$$\frac{d^2}{dp^2}\varphi(p) + (u - z^2)\varphi(p) = 0, \quad \text{với } u = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

Phương trình này tương tự như phương trình của dao động tử điều hòa trong x-biểu diễn. Kết quả ta được:

+ Năng lượng: $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$,

+ Hàm sóng: $\varphi(p) = (2^n n!\sqrt{\pi}p_0)^{-1/2} e^{-\frac{p^2}{2p_0^2}} H_n(p/p_0)$.

9. Trong biểu diễn xung lượng, hàm sóng có dạng:

$$\varphi(p) =< \psi_p(\vec{r})|\psi(r, \theta, \phi) >, \tag{7.98}$$

trong đó $\psi(\vec{r})$ là hàm riêng của toán tử xung lượng, có dạng:

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{r}}.$$

Thay $\psi(\vec{r})$ và $\psi(r, \theta, \phi)$ vào (7.98), ta được:

$$\varphi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{r}} dV.$$

Tính tích phân trong tọa độ cầu và giả sử ta chọn phương của xung lượng $\vec{p}$ song song với trục z, lúc đó $\vec{p}.\vec{r} = pr\cos\theta$, ta được:

$$\begin{aligned}
\varphi(p) &= \frac{1}{\pi\sqrt{2(a_0\hbar)^3}} \int_0^\infty \left[e^{-r/a_0} \int_{-1}^{1} e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta} d\cos\theta \right] r^2 dr, \\
&= \frac{1}{\pi p\sqrt{2a_0^3\hbar}} \int_0^\infty \left[e^{-r(\frac{1}{a_0} + i\frac{p}{\hbar})} - e^{-r(\frac{1}{a_0} - i\frac{p}{\hbar})} \right] r dr, \\
&= \frac{1}{\pi} \left(\frac{2a_0}{\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{[1 + (p^2/\hbar^2)a_0^2]^2}.
\end{aligned}$$

10. Phương trình đặc trưng tương ứng với ma trận A có dạng:

$$\begin{vmatrix} 7-a & 0 & 0 \\ 0 & 1-a & -i \\ 0 & i & -1-a \end{vmatrix} = 0 \to (7-a)\begin{vmatrix} 1-a & -i \\ i & -1-a \end{vmatrix} = (7-a)(a^2-2) = 0$$

Giải ra ta được:

$$a_1 = 7, \mathrm{a}_2 = \sqrt{2}, \mathrm{a}_3 = -\sqrt{2}.$$

Hàm riêng của A được cho bởi phương trình :

$$\mathrm{AC} = \mathrm{aC} \to \begin{pmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \to \begin{matrix} 7c_1 & = & ac_1 \\ c_2 - ic_3 & = & ac_2 \\ ic_2 - c_3 & = & ac_3 \end{matrix}$$

+ Khi $a = a_1 = 7$, ta được: $c_1 = 1,\ c_2 = c_3 = 0$
+ Khi $a = a_2 = \sqrt{2}$, ta được: $c_1 = 0,\ c_3 = i(\sqrt{2}-1)c_2$. Sử dụng điều kiện chuẩn hóa: $C^+C = 1$, ta tìm được: $c_2 = 1/\sqrt{2(2-\sqrt{2})}$. + Khi $a = a_2 = -\sqrt{2}$, ta được: $c_1 = 0,\ c_3 = -i(\sqrt{2}+1)c_2$. Sử dụng điều kiện chuẩn hóa: $C^+C = 1$, ta tìm được: $c_2 = 1/\sqrt{2(2+\sqrt{2})}$.

Chương 8

Spin và hệ hạt đồng nhất

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là thiết lập hàm sóng cho một hệ bao gồm nhiều hạt vi mô. Muốn vậy, các khái niệm cơ bản liên quan đến tính chất của một hệ hạt được khảo sát trước, đó là khái niệm spin, hàm sóng đối xứng và phản đối xứng.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ hiểu được nguồn gốc của khái niệm spin của hạt vi mô, biết các biểu diễn trạng thái của một hệ hạt Boson và hệ hạt Fermion, đồng thời hiểu được ý nghĩa của nguyên lý loại trừ Pauli.

§ 1 MÔMEN ĐỘNG LƯỢNG QUỸ ĐẠO VÀ MÔMEN TỪ QUỸ ĐẠO

Để đơn giản ta xét nguyên tử Hydro (hoặc các ion tương tự) chỉ có một electron. Chuyển động của electron quanh hạt nhân được đặc trưng bởi mô-men động lượng mà ta biểu diễn bằng các toán tử $\hat{L}^2$ và $\hat{L}_z$. Trị riêng tương ứng của các toán tử này là $L^2 = \hbar^2\ell(\ell+1)$ và $L_z = m\hbar$. Khi nguyên tử đứng yên thì mô-men động lượng của electron cũng là của nguyên tử. Mômen này gọi là mô-men cơ (mômen quỹ đạo) vì do chuyển động của electron quanh hạt nhân mà có. Ta biết rằng vì electron mang điện tích âm nên chuyển động của nó quanh hạt nhân tạo nên một dòng điện kín, dòng điện này tương đương với một nam châm mà đại lượng đặc trưng là mô-men từ mà ta gọi là mô-men từ

quỹ đạo.

Phép tính đại lượng này theo lý thuyết Bohr và lý thuyết của cơ học lượng tử đều cho kết quả như nhau và bằng:

$$\widehat{\vec{\mu}} = \frac{e}{2m_e c}\widehat{\vec{L}}. \tag{8.1}$$

Trị riêng của thành phần mô-men từ theo trục z là:

$$\mu_z = \frac{e}{2m_e c}L_z = \frac{e}{2m_e c}m\hbar = m\frac{e\hbar}{2m_e c} = m\mu_B, \tag{8.2}$$

với

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad \text{được gọi là Magneton Bohr.} \tag{8.3}$$

Cho đến nay chúng ta thấy trạng thái của một hạt vi mô được xác định bởi ba tọa độ (r, θ, ϕ) hoặc ba thành phần xung lượng (p_x, p_y, p_z). Kết quả là ta có một bộ đầy đủ các số lượng tử để xác định trạng thái của hệ, chẳng hạn như n, ℓ và m. Tuy nhiên hàng loạt sự kiện thực nghiệm chứng tỏ rằng việc mô tả trạng thái hạt vi mô như trên là chưa đầy đủ vì bản thân hạt vi mô còn có một thuộc tính nội tại nữa mà khi giải phương trình Schrodinger ta chưa xét đến.

§ 2 SỰ TÁCH MỨC NĂNG LƯỢNG CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO TRONG TỪ TRƯỜNG

Xét một nguyên tử Hydro đặt trong từ trường đều $\vec{\mathcal{H}}$. Vì nguyên tử Hydro có mô-men từ $\vec{\mu}$ nên sẽ chịu tác dụng của từ trường và có thêm năng lượng phụ là:

$$V' = \vec{\mu}\vec{\mathcal{H}}$$

Nếu chọn từ trường hướng theo trục z ($\vec{\mathcal{H}} : 0, 0, \mathcal{H}$), thì:

$$V' = -\mu_z \mathcal{H},$$

thay giá trị của μ_z từ (8.2) vào ta được

$$V' = -\frac{e\mathcal{H}}{2m_e c}L_z. \tag{8.4}$$

Biểu thức của toán tử năng lượng của nguyên tử Hydro trong từ trường bây giờ sẽ là:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}' = \hat{H}_0 - \frac{e\mathcal{H}}{2m_e c}\hat{L}_z \tag{8.5}$$

Vì toán tử $\hat{H}_0$ và toán tử $\hat{L}_z$ có chung hàm riêng, ta gọi hàm này là $\psi_{n\ell m}$, lúc đó phương trình (8.5) có thể viết lại như sau:

$$\hat{H}_0\psi_{n\ell m} = (E_n - \frac{e\mathcal{H}}{2m_e c}m\hbar)\psi_{n\ell m} = E_{nm}\psi_{n\ell m}. \tag{8.6}$$

Trong (8.6) $E_{nm}\psi_{n\ell m}$ là năng lượng của nguyên tử Hydro trong từ trường, có dạng

$$E_{n\ell m} = E_n - m\mu_B\mathcal{H}, \tag{8.7}$$

trong đó $\mu_B = \dfrac{e\hbar}{2m_e c}$ được gọi là "magneton Bohr".

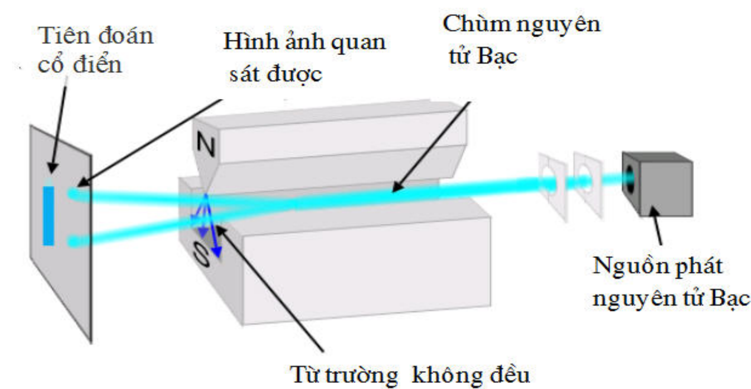
Theo (8.7) ta thấy năng lượng của nguyên tử bây giờ vừa phụ thuộc số lượng tử chính n vừa phụ thuộc vào số lượng tử từ m. Khi $n = 1$ thì $\ell = 0$ và $m = 0$, lúc đó năng lượng không thay đổi, nghĩa là mức năng lượng không bị tách ($E_{nm} = E_n$). Các mức năng lượng sẽ bị tách ở các trạng thái có $n \geq 2$. Chẳng hạn khi $n = 2$ thì $\ell = 0, 1$ và $m = 0, +1, -1$, các mức năng lượng tương ứng là $E_{20}, E_{21}, E_{2,-1}$. Như vậy, khi đặt nguyên tử trong từ trường thì từ trường sẽ khử sự suy biến của năng lượng, nghĩa là các trạng thái có cùng số lượng tử n nhưng khác số lượng tử m thì có năng lượng khác nhau. Nói cách khác, một mức năng lượng ứng với một giá trị đã cho của n bây giờ bị tách thành nhiều mức. Ta nói đã có sự tách mức năng lượng khi nguyên tử đặt trong từ trường. Sự tách mức năng lượng này dẫn đến sự tách vạch quang phổ khi nguyên tử được đặt trong từ trường.

§ 3 MÔ-MEN ĐỘNG LƯỢNG RIÊNG CỦA ELECTRON-SPIN CỦA HẠT VI MÔ

3.1 THÍ NGHIỆM STERN-GERLACH

Theo lý luận trên ta thấy ở trạng thái s $(\ell = 0, m = 0)$ thì không có sự tách vạch quang phổ, nghĩa là electron không chịu ảnh hưởng của từ trường. Nói cách khác, ở trạng thái s electron không có mô-men từ quỹ đạo. Tuy nhiên, với các máy quang phổ có năng suất phân giải cao người ta thấy rằng các nguyên tử ở trạng thái s vẫn có sự tách vạch quang phổ. Ví dụ, trạng thái của nguyên tử Natri được đặc trưng bởi lớp vỏ electron $3s^1$ (Na có cấu hình điện tử là $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$) gồm hai vạch sát nhau có bước sóng $5889, 95A^0$ và $5895, 93A^0$. Điều đó có nghĩa là các nguyên tử này vẫn chịu ảnh hưởng của từ trường, nghĩa là có một mô-men từ nào đó khác với mô-men từ quỹ đạo.

Một thí nghiệm kiểm chứng điều này là thí nghiệm được tiến hành tại đại học Frankfukt bởi hai nhà vật lý người Đức Otto Stern và Walther Gerlach năm (1921), được mô tả về nguyên lý như sau (Hình 8.1):



Hình 8.1: Sơ đồ của thí nghiệm Stern-Gerlach. Chùm nguyên tử đi vào miền có từ trường không đều bị lệch theo hai hướng đối diện nhau.

Cho một chùm nguyên tử Bạc (Ag) phát ra từ một lò nung sau đó đi qua một từ trường không đều rồi đập lên một màn chắn ở phía sau. Nguyên tử Ag

gồm 47 electron. Số lượng 46 electron ở bên trong tạo nên một lớp vỏ đối xứng cầu có mô-men động lượng bằng 0. Electron thứ 47 ở trạng thái 5s và cũng có mô-men động lượng quỹ đạo (ℓ) bằng 0. Theo lý luận ở trên về nguyên tắc ta sẽ quan sát thấy một vệt sáng ở trên màn vì nguyên tử Ag có $\ell = 0$ nên không có mô-men từ quỹ đạo. Nhưng trên thực tế lại có hai vệt sáng ở trên màn. Điều này chứng tỏ chùm nguyên tử Ag chịu tác dụng của từ trường không đồng nhất làm lệch quỹ đạo của nó.

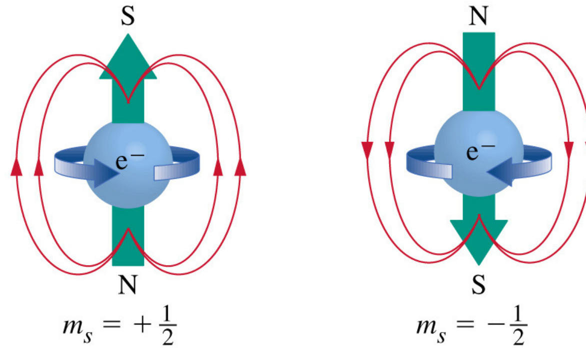
Như vậy khi mô-men động lượng quỹ đạo và do đó mô-men từ quỹ đạo của nguyên tử bằng không thì sự lệch hướng của chùm nguyên tử là do tác dụng của từ trường lên một loại mô-men từ khác của elctron. Mô-men từ này sinh ra do một chuyển động nào đó của electron khác với chuyển động quanh hạt nhân. Chuyển động này được gọi là chuyển động riêng của electron. Mô-men động lượng và mô-men từ ứng với chuyển động này được gọi là mô-men động lượng riêng và mô-men từ riêng.

3.2 SPIN CỦA HẠT VI MÔ

Để giải thích kết quả thí nghiệm Stern-Gerlach, S. A. Goudsmit và G. E. Uhlenbeck (1925) đã giả thiết rằng mô-men động lượng riêng và mô-men từ riêng của electron là do chuyển động tự quay quanh mình nó! Mômen động lượng riêng (intrinsic angular momentum) được gọi là mô-men động lượng spin hay đôi khi gọi tắt là spin, ký hiệu là $\vec{S}$.

Cần chú ý rằng khái niệm spin gắn liền với chuyển động tự quay của electron là một khái niệm không đúng. Khác với mô-men động lượng quỹ đạo, mô-men động lượng spin không phụ thuộc vào biến số tọa độ, toán tử tương ứng với nó không được biểu diễn bằng toán tử vi phân. Như vậy, mô-men động lượng spin là một đại lượng động lực gắn liền với lưỡng tính sóng-hạt của các đối tượng vi mô, là một khái niệm thuần túy cơ lượng tử và chưa có tiền lệ trong cơ học cổ điển.

Khái niệm spin của electron cũng được P. A. M. Dirac [1] chỉ ra trên cơ sở của cơ học lượng tử tương đối tính. Tương tự như mô-men động lượng quỹ



Hình 7.2: Spin của electron theo giải thích của Goudsmit và Uhlenbeck

đạo, mô-men động lượng spin cũng bị lượng tử hoá về cả độ lớn và hướng. Nếu mô-men động lượng quỹ đạo $\vec{L}$ được đặc trưng bởi số lượng tử ℓ và hình chiếu của nó được đặc trưng bởi số lượng tử m thì mô-men động lượng riêng cũng được đặc trưng bởi số lượng tử s và hình chiếu của spin lên trục z được đặc trưng bởi số lượng tử m_s.

Tương tự như vectơ $\vec{L}$, đối với vectơ mô-men động lượng spin $\vec{S}$, ta có:

$$|\vec{S}| = \sqrt{s(s+1)}\hbar \text{ và } S_z = m_s\hbar,$$

trongđó s được gọi là số lượng tử spin, m_s được gọi là số lượng tử hình chiếu spin. Giá trị của s phụ thuộc vào loại hạt vi mô và được chia thành hai nhóm:
+ Nhóm có giá trị của s là số nguyên: $s = 0, 1, 2...$
+ Nhóm có giá trị của s là số bán nguyên: $s = 1/2, 3/2....$

Thuộc về nhóm thứ nhất là các hạt Boson vì chúng tuân theo thống kê Bose-Einsten, trong lúc đó thuộc về nhóm thứ hai là các hạt Fermion vì chúng tuân theo thống kê Fermi-Dirac.

Electron trong nguyên tử thuộc về loại hạt Fermion có số lượng tử spin $s = 1/2$. Điều này được giải thích là vì chùm nguyên tử Ag trong thí nghiệm

[1] Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984)-Nhà Vật lý người Anh được giải Nobel năm 1933 (cùng với Erwin Schrodinger) nhờ các công trình trong nghiên cứu lý thuyết lượng tử. Ông đã tiên đoán bằng lý thuyết sự tồn tại của positron

Stern-Gerlach lệch theo hai hướng đối điện nhau nên spin của electron có hai cách định hướng khả dĩ ($2 = (2s+1)$). Do vậy, ta suy ra s chỉ có một giá trị duy nhất là $1/2$, trong lúc đó số lượng tử m_s có hai giá trị $m_s = 1/2, -1/2$.

§ 4 TOÁN TỬ SPIN

4.1 TOÁN TỬ SPIN VÀ HÀM SPIN CỦA HẠT VI MÔ

Theo Tiên đề II của cơ học lượng tử, mô-men động lượng spin $\vec{S}$ của electron tương ứng với một toán tử Hermite $\hat{\vec{S}}$. Toán tử spin có hệ thức giao hoán giống như toán tử mô-men động lượng quỹ đạo. Cụ thể là:

$$[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\epsilon_{jk\ell}\hat{S}_\ell \text{ và } [\hat{\vec{S^2}}, \hat{S}_j] = 0, \text{ với } j,k,\ell \text{chỉ} \quad x,y,z. \tag{8.8}$$

Ngoài ra, toán tử $\hat{\vec{S^2}}$ và $\hat{S}_z$ giao hoán nên chúng có hàm riêng chung:

$$\hat{\vec{S^2}}|s,m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1)|s,m_s\rangle, \quad \hat{S}_z|s,m_s\rangle = \hbar m_s|s,m_s\rangle, \tag{8.9}$$

trong đó $m_s = -s, -s+1, \ldots, -s+1, s$.

Các hàm riêng của toán tử spin tạo thành một hệ trực chuẩn và đầy đủ

$$\langle s', m_s'|s,m_s\rangle = \delta_{s',s}\delta_{m_s',m_s}, \quad \sum_{m_s=-s}^{s}|s,m_s\rangle\langle s,m_s| = I, \tag{8.10}$$

trong đó I là ma trận đơn vị.

4.2 SPIN 1/2 VÀ MA TRẬN PAULI

Đối với hạt có spin $\frac{1}{2}$ thì số lượng tử m_s nhận 2 giá trị: $m_s = -\frac{1}{2}$ và $\frac{1}{2}$. Như vậy hạt có thể ở một trong hai trạng thái: $|s,m_s\rangle = |\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ và $|s,m_s\rangle = |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$. Trị riêng của hai toán tử $\hat{\vec{S^2}}$ và $\hat{S}_z$ là

$$\hat{\vec{S^2}}\left|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2\left|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle, \hat{S}_z\left|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\left|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{8.11}$$

Bây giờ ta sẽ biểu diễn các toán tử spin dưới dạng ma trận Pauli:

Khi $s = \frac{1}{2}$ ta có thể biểu diễn toán tử spin dưới dạng ma trận Pauli (2x2) $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, được định nghĩa như sau:

$$\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j, \tag{8.12}$$

với σ_j được gọi là các ma trận Pauli, j=x, y, z.

Từ hệ thức (8.12), ta thấy ma trận Pauli có trị riêng bằng ± 1 và bình phương của nó chính là ma trận đơn vị, $\sigma_j^2 = I$. Thay (8.12) vào (8.8) ta được hệ thức:

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jk\ell}\sigma_\ell. \tag{8.13}$$

Ví dụ 4.1:

Chứng minh rằng các ma trận Pauli thỏa mãn hệ thức phản giao hoán

$$[\sigma_j, \sigma_k]_+ = 0 \Rightarrow \sigma_j\sigma_k = -\sigma_k\sigma_j. \tag{8.14}$$

Lời giải

Từ hệ thức (8.13), ta có hệ thức cụ thể sau

$$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z. \tag{8.15}$$

Nhân 2 vế của (8.15) lần lượt cho σ_y về bên trái rồi về bên phải, ta được

$$\sigma_y(\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x) = 2i\sigma_y\sigma_z$$
$$(\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x)\sigma_y = 2i\sigma_z\sigma_y,$$

hay

$$\sigma_y\sigma_x\sigma_y - \sigma_y^2\sigma_x = 2i\sigma_y\sigma_z$$
$$\sigma_x\sigma_y^2 - \sigma_y\sigma_x\sigma_y = 2i\sigma_z\sigma_y.$$

Cộng hai phương trình trên theo từng vế với lưu ý là $\sigma_y^2 = I$, ta được:

$$\sigma_x I - I\sigma_x = 2i(\sigma_z\sigma_y + \sigma_y\sigma_z) \rightarrow \sigma_z\sigma_y + \sigma_y\sigma_z = 0.$$

Bây giờ ta tìm dạng tường minh của các ma trận Pauli. Trước hết ta giả sử rằng ma trận σ_z có dạng chéo

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8.16}$$

Theo lý thuyết biểu diễn điều này có nghĩa là ta xét trong S_z-biểu diễn. Về mặt vật lý, điều này có nghĩa là trục z được chọn là trục lượng tử hóa của spin, trong đó hình chiếu của spin lên trục z có giá trị là $\pm\frac{1}{2}\hbar$. Đặt:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \text{ và } \sigma_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}. \tag{8.17}$$

Dùng hệ thức phản giao hoán (8.14): $\sigma_x\sigma_z = -\sigma_z\sigma_x$:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \tag{8.18}$$

hay:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & -a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_{11} & -a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}. \tag{8.19}$$

Từ đó ta được:

$$a_{11} = -a_{11} \to a_{11} = 0; \quad a_{22} = -a_{22} \to a_{22} = 0.$$

Vậy ma trận σ_x trở thành:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}. \tag{8.20}$$

Để tìm các số hạng a_{12} và a_{21} ta sử dụng tính chất $(\sigma_x)^2 = I$:

$$(\sigma_x)^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{12}a_{21} & 0 \\ 0 & a_{21}a_{12} \end{pmatrix}, \tag{8.21}$$

từ đó: $a_{12}a_{21} = 1$ và $a_{21}a_{12} = 1$ hay$|a_{12}|^2 = 1$.
Suy ra: $a_{12} = e^{i\alpha}$ và: $a_{21} = e^{-i\alpha}$ với: α là hằng số thực.

Như vậy dạng của ma trận σ_x là:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}. \tag{8.22}$$

Hoàn toàn tương tự ta có thể tìm được dạng của ma trận σ_y:

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{với } \beta \text{ là hằng số thực.} \tag{8.23}$$

Để tìm các hệ số α và β ta dùng hệ thức phản giao hoán của các ma trận σ_x và σ_y

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}.$$

Thực hiện phép nhân ma trận ta được: $e^{i\alpha-\beta} = -e^{i\alpha-\beta}$,
hay: $\cos(\alpha-\beta) = 0 \Rightarrow \alpha - \beta = \pi/2$. Nếu chọn $\alpha = 0$ thì $\beta = -\pi/2$.

Như vậy, dạng của các ma trận Pauli trong S_z biểu diễn là:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{8.24}$$

Từ đó, dạng của toán tử hình chiếu spin trong biểu diễn của S_z là:

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix}; \ \hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix}; \ \hat{S}_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}. \tag{8.25}$$

Toán tử mô-men spin toàn phần là:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} I. \tag{8.26}$$

Ví dụ 4.2:

Tìm các mức năng lượng của hạt có spin $s = 3/2$ với Hamiltonian được cho bởi:

$$\hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar^2}(\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 - 2\hat{S}_z^2) - \frac{\beta}{\hbar}\hat{S}_z,$$

trong đó α, β là các hằng số.

Lời giải

Ta viết lại Hamiltonian dưới dạng sau:

$$\hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar^2}(\hat{S}^2 - 3\hat{S}_z^2) - \frac{\beta}{\hbar}\hat{S}_z,$$

lúc đó năng lượng tương ứng có dạng

$$E_{m_s} = \frac{\alpha}{\hbar^2}[\hbar^2 s(s+1) - 3\hbar^2 m_s^2] - \frac{\beta}{\hbar}\hbar m_s,$$

thay $s = 3/2$ vào ta được

$$E_{m_s} = \frac{15}{4}\alpha - m_s(3\alpha m_s + \beta),$$

trong đó số lượng tử $m_s = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

4.3 HÀM SPIN

Ta đã khảo sát toán tử đặc trưng cho mô-men động lượng spin của electron. Ta cũng đã biết rằng spin của electron nói riêng và của hạt vi mô nói chung là một đại lượng cơ bản liên quan đến lưỡng tính sóng hạt của hạt vi mô. Như vậy, hàm sóng diễn tả trạng thái của hạt vi mô không những chỉ phụ thuộc vào ba biến số tọa độ $\vec{r} = (x, y, z)$ hoặc r, θ, ϕ, mà còn phụ thuộc vào biến số spin. Hàm sóng của hạt vi mô trong trường hợp này có dạng:

$$\Psi = \Psi(x, y, z, S_z, t). \tag{8.27}$$

Đối với electron và các hạt có $s = 1/2$ thì S_z có hai giá trị là $\pm\hbar/2$ nên hàm sóng có thể được tách thành hai phần và có thể được biểu diễn bởi một ma trận cột:

$$\Psi = \Psi(x, y, z, S_z, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi(x, y, z, \hbar/2, t) \\ \Psi(x, y, z, -\hbar/2, t) \end{pmatrix}. \tag{8.28}$$

Các hàm Ψ_1 và Ψ_2 có ý nghĩa như sau: $|\Psi_1|^2 dV$ là xác suất để tại thời điểm t hạt ở trong nguyên tố thể tích dV có hình chiếu spin lên trục z bằng $\hbar/2$.

$|\Psi_2|^2 dV$ là xác suất để tại thời điểm t hạt ở trong nguyên tố thể tích dV có hình chiếu spin lên trục z bằng $-\hbar/2$. Hàm $\Psi(x, y, z, S_z, t)$ thoả mãn điều kiện chuẩn hoá sau:

$$\sum_{S_z} \int_V |\Psi(x, y, z, S_z, t)|^2 dV = 1.$$

Tổng được lấy theo mọi hình chiếu khả dĩ của S_z. Vì tọa độ spin độc lập với tọa độ không - thời gian nên hàm (8.27) có thể viết dưới dạng phân ly biến số:

$$\Psi(x, y, z, S_z, t) = \Psi(x, y, z, t)\varphi(S_z),$$

với

$$\varphi(S_z) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{8.29}$$

là hàm spin. c_1, c_2 là những hằng số sao cho $|c_1|^2$ và $|c_2|^2$ tỉ lệ với xác suất để tìm thấy hạt có spin tương ứng là $\hbar/2$ và $-\hbar/2$. Các hệ số c_1 và c_2 phải thoả mãn điều kiện chuẩn hoá:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \tag{8.30}$$

Bây giờ ta tìm hàm riêng của toán tử hình chiếu spin S_z trong S_z-biểu diễn. Phương trình trị riêng của $\hat{S}_z$:

$$\hat{S}_z\varphi = S_z\varphi,$$

hay

$$\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = S_z \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \tag{8.31}$$

Suy ra: $\hbar/2 c_1 = S_z c_1$ và $-\hbar/2 c_2 = S_z c_2$. Như vậy, ta có hai trường hợp

- khi $S_z = \hbar/2$ thì $c_1 \neq 0; c_2 = 0$,

- khi $S_z = -\hbar/2$ thì $c_1 = 0; c_2 \neq 0$.

Từ điều kiện chuẩn hoá (8.30) ta tìm được: $c_1 = e^{i\alpha_1}$ và $c_2 = e^{i\alpha_2}$. Như vậy, hàm riêng của toán tử $\hat{S}_z$ là:

$$\varphi_{(S_z=\hbar/2)} = e^{i\alpha_1}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \qquad \varphi_{(S_z=-\hbar/2)} = e^{i\alpha_2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \qquad (8.32)$$

Ví dụ 4.3.1:

Tìm hàm riêng của toán tử hình chiếu $\hat{S}_x$ và $\hat{S}_y$ trong S_z biểu diễn.

Lời giải

Phương trình trị riêng của toán tử $\hat{S}_x$ là

$$\hat{S}_x\varphi = S_x\varphi, \quad \text{trong đó : } \quad \hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \varphi = \begin{pmatrix} \mathrm{c}_1 \\ \mathrm{c}_2 \end{pmatrix}.$$

nên ta có phương trình ma trận:

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{c}_1 \\ \mathrm{c}_2 \end{pmatrix} = \pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{c}_1 \\ \mathrm{c}_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} \mathrm{c}_1 \\ \mathrm{c}_2 \end{pmatrix}.$$

Khi $S_x = +\hbar/2$ thì $c_1 = c_2$, khi $S_x = -\hbar/2$ thì $c_1 = -c_2$.
Từ điều kiện chuẩn hóa $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, nên khi $S_z = +\hbar/2$ thì $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\beta}$, khi $S_z = -\hbar/2$ thì $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\beta} = -c_2$.
Như vậy, hàm riêng của toán tử $\hat{S}_x$ là:

$$\varphi_{(S_x=\pm\hbar/2)} = \frac{e^{i\beta}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \ \beta \text{ là một hằng số thực bất kỳ.} \qquad (8.33)$$

Tương tự, ta tính được hàm riêng của toán tử $\hat{S}_y$ là:

$$\varphi_{(S_y=\pm\hbar/2)} = \frac{e^{i\gamma}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mp i \\ 1 \end{pmatrix}, \ \gamma \text{ là một hằng số thực bất kỳ.} \qquad (8.34)$$

§ 5 HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT

5.1 NGUYÊN LÝ KHÔNG PHÂN BIỆT CÁC HẠT ĐỒNG NHẤT

Người ta gọi các hạt đồng nhất là các hạt có cùng khối lượng, điện tích, spin... và trong những điều kiện vật lý giống nhau thì sẽ biểu hiện như nhau. Đối với các hạt cổ điển tuân theo cơ học Newton thì các hạt đồng nhất là có thể phân biệt được vì chúng có quỹ đạo xác định. Trong cơ học lượng tử tình hình sẽ khác hẳn. Vì hạt vi mô tuân theo nguyên lý bất định Heisenberg nên khái niệm quỹ đạo của hạt không còn ý nghĩa nữa. Nếu vị trí của hạt biết được chính xác tại một thời điểm nào đó thì tại thời điểm sau, tọa độ của chúng hoàn toàn không thể xác định được. Như vậy trong cơ học lượng tử về nguyên tắc không tồn tại khả năng cho phép ta theo dõi và phân biệt các hạt riêng rẻ trong một hệ hạt đồng nhất. Các hạt trong hệ hạt đồng nhất hoàn toàn mất hết "tính cá thể "của mình. Nguyên lý không phân biệt các hạt đồng nhất có thể phát biểu như sau: " *Các hạt đồng nhất là không thể phân biệt được*". Nói cách khác Hamitonian của hệ N hạt đồng nhất không thay đổi trong phép hoán vị tọa độ (spin và không gian) của các hạt bất kỳ ở trong hệ.

Thật vậy, Hamiltonian của hệ N hạt đồng nhất là:

$$\hat{H}(\xi_1, \xi_2, ..., \xi_i, \xi_j, ...) = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\xi_i) + \sum_{i,j=1}^{N} W(\xi_i, \xi_j) \right] = \sum_i \hat{H}_i, \tag{8.35}$$

trong đó ξ_i là tập hợp các biến số không gian và biến số spin của hạt thứ i. Nếu ta hoán vị tọa độ của hai hạt bất kỳ trong hệ (ví dụ hạt thứ i và thứ j) thì theo (8.35), ta được:

$$\hat{H}(\xi_1, \xi_2, ..., \xi_j, \xi_i, \dots \xi_N) = \sum_i \hat{H}_i.$$

Điều này chứng tỏ Hamitonian của hệ không thay đổi trong phép hoán vị tọa độ hai hạt trong hệ.

5.2 TRẠNG THÁI ĐỐI XỨNG VÀ PHẢN ĐỐI XỨNG

Gọi $\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_i, \xi_j, \ldots \xi_N)$ là hàm sóng ở trạng thái dừng của hệ N hạt đồng nhất. Nếu hoán vị tọa độ của hai hạt thứ i và j thì hàm sóng của hệ bây giờ là $\phi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_j, \xi_i, ...)$. Theo nguyên lý hệ hạt đồng nhất thì hai hàm ψ và ϕ biểu diễn cùng một trạng thái, nghĩa là: $\phi = c\psi$, hay:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_i, \xi_j, \ldots \xi_N) = c\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_j, \xi_i, \ldots \xi_N),$$

nếu hoán vị thêm 1 lần nữa $(j \leftrightarrow i)$ thì

$$\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_i, \xi_j, \ldots \xi_N) = c^2\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_j, \xi_i, \ldots \xi_N).$$

Từ đó ta thấy $c^2 = 1$ hay $c = \pm 1$. Như vậy ta có hai trường hợp:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_i, \xi_j, \ldots \xi_N) = +\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_j, \xi_i, ...), \tag{8.36}$$

$$\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_i, \xi_j, \ldots \xi_N) = -\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_j, \xi_i, ...). \tag{8.37}$$

Trong trường hợp (8.36) hàm sóng được gọi là đối xứng ψ_s, còn hàm sóng ứng với trường hợp (8.37) gọi là phản đối xứng ψ_a[2]. Người ta chứng minh được rằng hệ hạt đồng nhất chỉ có thể ở một trong hai trạng thái đối xứng hoặc phản đối xứng và trạng thái đó không đổi theo thời gian. Thực nghiệm chứng tỏ rằng các hạt trong tự nhiên thuộc về hai lớp khác nhau. Lớp thứ nhất là các hạt có spin bằng một số nguyên lần hằng số Planck:

$$s = N\hbar \qquad N = 0, 1, 2....$$

Trạng thái của các hạt này được mô tả bởi hàm sóng đối xứng. Các hạt như thế được gọi là hạt Boson. Trong vật lý thống kê các hạt này tuân theo thống kê Bose-Einstein. Ngược lại, các hạt có spin bằng một nửa số nguyên của hằng số Planck

$$s = (N + 1/2)\hbar, \qquad N = 0, 1, 2....$$

[2]ký hiệu s là viết tắt của symmetric=đối xứng, a: viết tắt của asymmetric=phản đối xứng

được mô tả bởi hàm sóng phản đối xứng. Các hạt này được gọi là hạt Fermion và tuân theo thống kê Fermi-Dirac. Các hạt Boson gồm: π-meson (s=0), photon ($s = 1$), deuteron (s=1), hạt α (s=0). Các hạt Fermion gồm: electron, proton, neutron, neutrino..., tất cả đều có $s = 1/2$.

5.3 HÀM SÓNG CỦA HỆ HẠT ĐỒNG NHẤT KHÔNG TƯƠNG TÁC

Xét hệ N hạt đồng nhất không tương tác. Hàm sóng của hệ là nghiệm của phương trình Schrodinger dừng:

$$\left[\sum_{i=1}^{N} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\xi_i)\right]\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_N) = E\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_N) \tag{8.38}$$

Do các hạt là độc lập, nên nghiệm của phương trình (8.38) có thể viết dưới dạng tích các hàm sóng của các hạt riêng lẻ:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, ...\xi_N) = \psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2)...\psi_{\alpha_N}(\xi_N), \tag{8.39}$$

trong đó α_i là tập hợp các số lượng tử đặc trưng cho trạng thái của hạt thứ i. Hàm $\psi_{\alpha_i}(\xi_i)$ chính là nghiệm của phương trình Schrodinger cho một hạt:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i + U(\xi_i)\right]\psi_{\alpha_i}(\xi_i) = E\psi_{\alpha_i}(\xi_i). \tag{8.40}$$

Vì phương trình (8.40) là tuyến tính nên tổ hợp tuyến tính của các nghiệm (8.39) cũng là nghiệm của nó. Do vậy, ta có thể chọn những tổ hợp tuyến tính của (8.39) để thoả mãn những yêu cầu đối xứng cần thiết.

Trước hết ta xét trường hợp hệ chỉ có hai hạt.

Các hàm sóng của hệ trước và sau khi hoán vị hai hạt là:

$$\psi_1(\xi_1, \xi_2) = \psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) \quad \text{và } \psi_2(\xi_1, \xi_2) = \psi_{\alpha_1}(\xi_2)\psi_{\alpha_2}(\xi_1).$$

Hai hàm $\psi_1(\xi_1, \xi_2)$ và $\psi_2(\xi_1, \xi_2)$ đều ứng cùng một giá trị năng lượng. Vậy tổ hợp tuyến tính của hai hàm này cũng ứng với cùng một năng lượng. Như vậy,

khi hoán vị vị trí hai hạt trong hệ, thì hàm sóng của hệ tương ứng cho trường hợp đối xứng và phản đối xứng là:

$$\psi_s = C_1[\psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) + \psi_{\alpha_2}(\xi_1)\psi_{\alpha_1}(\xi_2)], \tag{8.41}$$

$$\psi_a = C_1[\psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) - \psi_{\alpha_2}(\xi_1)\psi_{\alpha_1}(\xi_2)]. \tag{8.42}$$

Hệ số C_1 và C_2 trong 2 biểu thức trên được xác định từ điều kiện chuẩn hoá:

$$\int |\psi_s|^2 d\xi_1 d\xi_2 = 1 \quad \text{và} \quad \int |\psi_a|^2 d\xi_1 d\xi_2 = 1,$$

từ đó ta tìm được: $c_1 = 1/\sqrt{2}$ và $c_2 = 1/\sqrt{2}$.

Biểu thức (8.41) và (8.42) có thể viết dưới dạng tổng quát như sau:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \psi_{\alpha 1}(\xi_1)\psi_{\alpha 2}(\xi_2), \tag{8.43}$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \psi_{\alpha 1}(\xi_1)\psi_{\alpha 2}(\xi_2), \tag{8.44}$$

trong đó $\hat{\mathcal{P}}$ là toán tử hoán vị, tổng lấy theo các hoán vị khả dĩ, $(-1)^{\mathcal{P}} = 1$ đối với trường hợp hoán vị chẵn (nghĩa là hoán vị cả ξ_1 , ξ_2 và α_1, α_2), trong lúc đó $(-1)^{\mathcal{P}} = -1$ đối với trường hợp hoán vị lẽ (nghĩa là hoán vị ξ_1 , ξ_2 nhưng không α_1, α_2 hoặc ngược lại). Chú ý rằng biểu thức (8.44) có thể viết dưới dạng định thức Slater như sau:

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha 1}(\xi_1) & \psi_{\alpha 1}(\xi_2) \\ \psi_{\alpha 2}(\xi_1) & \psi_{\alpha 2}(\xi_2) \end{vmatrix}.$$

Một cách tổng quát, ta có thể viết hàm sóng cho trường hợp N hạt.

Đối với hệ hạt Boson:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) \ldots \psi_{\alpha_N}(\xi_N), \tag{8.45}$$

Đối với hệ Fermion:

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}} \psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) \ldots \psi_{\alpha_N}(\xi_N), \tag{8.46}$$

Biểu thức (8.46) được viết dưới dạng định thức Slater:

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N}!}\begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(\xi_1) & \psi_{\alpha_1}(\xi_2)\ldots & \psi_{\alpha_1}(\xi_N) \\ \psi_{\alpha_2}(\xi_1) & \psi_{\alpha_2}(\xi_2)\ldots & \psi_{\alpha_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(\xi_1) & \psi_{\alpha_N}(\xi_2)\ldots & \psi_{\alpha_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \tag{8.47}$$

Hệ thức (8.45) và (8.46) nghiệm đúng đối với trường hợp các chỉ số $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_N$ là hoàn toàn khác nhau. Trong trường hợp nếu có một số trạng thái trùng nhau thì:

- Đối với hệ hạt Boson: Hàm sóng có dạng

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, ..., \xi_N) = \sqrt{\frac{N_1!N_2!...N_N!}{N!}}\sum_P \hat{P}\psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2)...\psi_{\alpha N}(\xi_N), \tag{8.48}$$

  trong đó N_i là số các chỉ số có cùng giá trị như nhau α_i. Ví dụ, đối với trường hợp 3 hạt Boson với $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, hàm sóng của hệ có dạng:

$$\begin{aligned} \psi_s(\xi_1, \xi_2, \xi_3) &= \sqrt{\frac{2!}{3!}}\sum_P \hat{P}\psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2)\psi_{\alpha 3}(\xi_3) \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}[\psi_\alpha(\xi_1)\psi_\alpha(\xi_2)\psi_{\alpha 3}(\xi_3) \\ &\quad + \psi_\alpha(\xi_1)\psi_{\alpha_3}(\xi_2)\psi_\alpha(\xi_3) \\ &\quad + \psi_{\alpha_3}(\xi_1)\psi_\alpha(\xi_2)\psi_\alpha(\xi_3)]. \end{aligned} \tag{8.49}$$

- Đối với hệ hạt Fermion nếu có hai chỉ số trùng nhau thì hàm sóng sẽ bằng không, chẳng hạn khi $\alpha_1 = \alpha_2$ thì định thức trong (8.47) triệt tiêu vì có hai hàng giống nhau.

Ví dụ 5.1:

Xét một hệ hạt không tương tác gồm 3 hạt chuyển động trong giếng thế một chiều vuông góc sâu vô hạn bề rộng a. Xác định năng lượng và hàm sóng của hệ ở trạng thái cơ bản và trạng thái kích thích thứ nhất và thứ hai cho các trường

hợp sau:

a) Hệ hạt không có spin và phân biệt được với khối lượng $m_1 < m_2 < m_3$,

b) Hệ hạt Boson đồng nhất,

c) Hệ hạt Fermion đồng nhất có spin 1/2.

Lời giải

Do các hạt chuyển động độc lập nhau nên phương trình Schrodingercủa hệ 3 hạt trong giếng thế

$$\sum_{i=1}^{3}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{d^2}{dx_i^2}\right]\psi_{n_1,n_2,n_3}(x_1,x_2,x_3) = E_{n_1,n_2,n_3}\psi_{n_1,n_2,n_3}(x_1,x_2,x_3),$$

có thể tách thành 3 phương trình cho từng hạt riêng lẻ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{d^2\psi_{n_i}(x_i)}{dx_i^2} = \varepsilon_{n_i}\psi_{n_i}(x_i), \quad i = 1,2,3,$$

trong đó

$$\varepsilon_{n_i} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_i^2}{2m_i a^2}, \quad \psi_{n_i}(x_i) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n_i\pi}{a}x_i\right)$$

Năng lượng và hàm sóng toàn phần của hệ là:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2}\left(\frac{n_1^2}{m_1}+\frac{n_2^2}{m_2}+\frac{n_3^2}{m_3}\right),$$

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(x_1,x_2,x_3) = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x_1\right)\sin\left(\frac{n_2\pi}{a}x_2\right)\sin\left(\frac{n_3\pi}{a}x_3\right).$$

a) Hệ hạt phân biệt được với s=0:

(i) Trạng thái cơ bản của hệ tương ứng với trường hợp khi cả 3 hạt đều ở trạng thái cơ bản, $n_1 = n_2 = n_3 = 1$, vì vậy

$$E^{(0)} = E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2}\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}+\frac{1}{m_3}\right),$$

$$\psi^{(0)} = \psi_{1,1,1}(x_1,x_2,x_3) = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x_3\right).$$

(ii) Trạng thái kích thích thứ nhất ứng với trường hợp hạt thứ 3 (có khối lượng lớn nhất) ở mức $n_3 = 2$, trong lúc hạt 1 và hạt 2 vẫn ở mức $n_1 = n_2 = 1$, năng

lượngvà hàm sóng tương ứng là:

$$E^{(1)} = E_{1,1,2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} + \frac{4}{m_3}\right),$$

$$\psi^{(1)} = \psi_{1,1,2}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x_3\right).$$

(iii) Trạng thái kích thích thứ hai tương ứng với trường hợp khi hạt 2 và hạt 3 ở mức $n_2 = n_3 = 2$, còn hạt 1 ở mức $n_1 = 1$:

$$E^{(2)} = E_{1,2,2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{4}{m_2} + \frac{4}{m_3}\right),$$

$$\psi^{(2)} = \psi_{1,2,2}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x_3\right).$$

b) Hệ hạt Boson đồng nhất:

(i) Do hạt là Boson nên cả ba hạt đều ở trạng thái cơ bản với năng lượng thấp nhất:

$$E^{(0)} = E_{1,1,1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2}\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m} + \frac{1}{m}\right) = 3\varepsilon_1 = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2},$$

$$\psi^{(0)} = \psi_{1,1,1}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x_3\right).$$

(ii) Trạng thái kích thích thứ nhất ứng với trường hợp hai hạt ở mức $n_1 = 1$ và hạt còn lại ở mức $n_3 = 2$,như vậy:

+ Năng lượng $E^{(1)} = 2\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 2\varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 = 6\varepsilon_1 = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}$,

+ Hàm sóng: Vì các hạt là đồng nhất nên ta không thể nói hạt nào ở trạng thái nào mà ta chỉ có thể nói hai hạt ở trạng thái ψ_1 và hạt còn lại ở trạng thái ψ_2. Vì giá trị $n = 1$ xuất hiện 2 lần nên áp dụng công thức (8.48), ta được:

$$\psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{2!}{3!}}[\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) + \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3) + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_1(x_3)].$$

(iii) Trạng thái kích thích thứ hai ứng với trường hợp một hạt ở mức $n = 2$ và 2 hạt còn lại ở mức $n = 2$, ta được:

+ Năng lượng $E^{(2)} = \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 8\varepsilon_2 = 9\varepsilon_1 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$,
+ Hàm sóng: Vì ta có 2 hạt ở trạng thái ψ_2 và hạt còn lại ở trạng thái ψ_1, nên $n = 2$ xuất hiện 2 lần, áp dụng công thức (8.48), ta được:

$$\psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{2!}{3!}}[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_2(x_3) + \psi_2(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) + \psi_2(x_1)\psi_2(x_2)\psi_1(x_3)].$$

c) Hệ hạt Fermion đồng nhất với s=1/2:
(i) Trạng thái cơ bản ứng với trường hợp 2 hạt ở trạng thái thấp nhất ψ_1 với spin đối song (1 hạt có spin hướng lên $|+>=|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$, 1 hạt có spin hướng xuống $|->=|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$. Hạt thứ 3 ở trạng thái ψ_2 với spin bất kỳ (có thể hướng lên hoặc hướng xuống: $|\pm>=|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2})$. Năng lượng của trạng thái cơ bản là:
+ Năng lượng $E^{(0)} = 2\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 2\varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 = 6\varepsilon_1 = \frac{6\pi^2\hbar^2}{ma^2}$,
+ Hàm sóng ứng với trạng thái cơ bản là phản đối xứng và có dạng:

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \psi_2(x_3)\chi(S_3) \end{vmatrix}$$

Trạng thái này suy biến bậc 4 vì có 4 cách để sắp xếp spin của 3 hạt (xem Hình 8.2).

Vì $\chi(S_1) = |\pm>, \chi(S_2) = |\pm>$ và $\chi(S_3) = |\pm>$ nên phải lự chọn các trạng thái spin này sao cho không có 2 hàng hoặc hai cột của định thức (5.3) giống nhau, chẳng hạn:

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} \psi_1(x_1)|+> & \psi_1(x_2)|-> & \psi_1(x_3)|+> \\ \psi_1(x_1)|-> & \psi_1(x_2)|+> & \psi_1(x_3)|+> \\ \psi_2(x_1)|+> & \psi_2(x_2)|+> & \psi_2(x_3)|-> \end{vmatrix}.$$

(ii) Trạng thái kích thích thứ nhất tương ứng với một hạt ở trạng thái thấp nhất ψ_1 (hướng spin bất kỳ) và hai hạt ở trạng thái ψ_2 (1 hạt có spin hướng

lên, 1 hạt có spin hướng xuống). Có 4 cách để sắp xếp spin của 3 hạt như ở Hình 8.2:

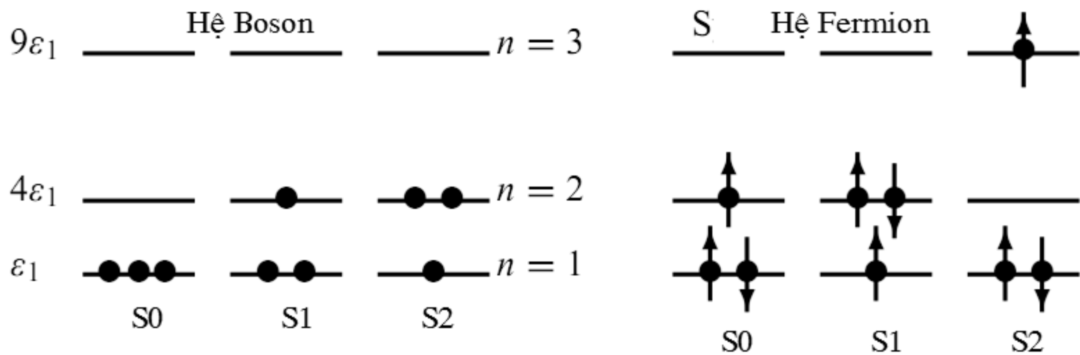
$$\psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \psi_2(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_2(x_1)\chi(S_1) & \psi_2(x_2)\chi(S_2) & \psi_2(x_3)\chi(S_3). \end{vmatrix}$$

Năng lượng tương ứng là: $E^{(1)} = \varepsilon_1 + 2\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 8\varepsilon_1 = 9\varepsilon_1 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

(iii) Trạng thái kích thích thứ hai ứng với trường hợp 2 hạt ở trạng thái ψ_1 (hướng spin đối nhau) và hạt thứ ba ở trạng thái ψ_3 (hướng spin bất kỳ). Trạng thái này cũng có 4 cách sắp xếp spin, vì vập suy biến bậc 4:

$$\psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_1(x_1)\chi(S_1) & \psi_1(x_2)\chi(S_2) & \psi_1(x_3)\chi(S_3) \\ \psi_3(x_1)\chi(S_1) & \psi_3(x_2)\chi(S_2) & \psi_3(x_3)\chi(S_3). \end{vmatrix}$$

Năng lượng tương ứng là: $E^{(2)} = 2\varepsilon_1 + \varepsilon_3 = 2\varepsilon_1 + 9\varepsilon_1 = 11\varepsilon_1 = \frac{11\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.



Hình 8.2: Sự phân bố các hạt trên các mức năng lượngcủa trạng thái cơ bản (S0), trạng thái kích thích thứ nhất (S1) và trạng thái kích thích thứ hai (S2) đối với hệ 3 hạt đồng nhất không tương tác chuyển động trong giếng thế một chiều vuông góc sâu vô hạn.

5.4 NGUYÊN LÝ LOẠI TRỪ PAULI

Xét một hệ N hạt Fermion. Giả sử trong hệ có hai hạt ở trong cùng một chỉ số trạng thái lúc đó hàm sóng của hệ bằng không, nghia xlà hệ không tồn tại. Để cho hệ tồn tại, nghĩa là $\psi_a \neq 0$ thì các chỉ số trạng trái của các hạt trong hệ phải khác nhau. Từ đó ta có nguyên lý loại trừ Pauli như sau:
Trong một hệ hạt Fermion đồng nhất, không thể có hai hạt ở cùng một trạng thái.

Chẳng hạn đối với nguyên tử mà electron được đặc trưng bởi bộ bốn số lượng tử n, ℓ, m, m_s thì không thể có hai electron có cùng trạng thái. Nguyên lý Pauli là nguyên lý quan trọng nhất chi phối cấu trúc của nguyên tử vì thế nó cho ta hiểu được tính quy luật của cấu trúc của nguyên tử có nhiều electron và của các hạt nhân phức tạp. Cần lưu ý rằng nguyên lý này do Wolfgang Pauli [3] nêu ra năm 1925 trên cơ sở phân tích phổ phát xạ của các nguyên tử phức tạp.

§ 6 TÓM TẮT CHƯƠNG 8

- Spin của hạt vi mô là một đại lượng mới, chưa có tiền lệ trong cơ cổ điển. Đây là đại lượng gắn liền với lưỡng tính sóng-hạt của hạt vi mô.

- Do spin là mô-men động lượng riêng của hạt nên ta có thể sử dụng các hệ thức giao hoán và phương trình trị riêng của toán tử mô-men động lượng quỹ đạo vào việc mô tả toán tử spin. Toán tử spin của hạt có spin 1/2 được biểu diễn dưới dạng các ma trận (2x2). Trong S_z biểu diễn, dạng của chúng được cho bởi các biểu thức (8.25) và (8.26).

- Hàm sóng của một hệ hạt đồng nhất không tương tác có thể biểu diễn

[3] Wolfgang Pauli (1900-1958): Nhà Vật lý Mỹ gốc Ao, từng giảng dạy Vật lý tại Đại học Gottinggen, Copenhagen và Hamburg. Từ năm 1928 là giáo sư vật lý lý thuyết tại Học viện kỹ thuật Zurich và cũng là giáo sư thỉnh giảng của Học viện Nghiên cứu cao cấp Princeton, New Jersey. Năm 1925 ông đưa ra nguyên lý loại trừ (exclusion principle) mang tên mình, ngoài ra năm 1935 ông còn đề ra giả thuyết về sự tồn tại của Neutrino. Ông được giải Nobel về Vật lý năm 1945

dưới dạng tổng các tích hàm sóng của từng hạt riêng rẽ trong đó có tính đến tính chất đối xứng hoặc phản đối xứng khi hoán vị các hạt. Hàm sóng của hệ hạt Boson có dạng (8.48) và hàm sóng của hệ hạt Fermion được biểu diễn dưới bằng định thức Slater dạng (8.46). Từ định thức Slater ta suy ra được nguyên lý loại trừ Pauli cho hệ hạt Fermion đồng nhất không tương tác.

§ 7 BÀI TẬP CHƯƠNG 8

1. Cho hệ thức

$$e^{i\lambda\hat{G}}\hat{A}e^{-i\lambda\hat{G}} = \hat{A} + i\lambda[\hat{G},\hat{A}] + \frac{(i\lambda)^2}{2!}[\hat{G},[\hat{G},\hat{A}]] + ..., \tag{8.50}$$

hãy chứng rằng nếu $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ là các toán tử hình chiếu spin thì

$$e^{i\hat{S}_z\varphi/\hbar}\hat{S}_x e^{-i\hat{S}_z\varphi/\hbar} = \hat{S}_x\cos\varphi - \hat{S}_y\sin\varphi,$$
$$e^{i\hat{S}_z\varphi/\hbar}\hat{S}_y e^{-i\hat{S}_z\varphi/\hbar} = \hat{S}_y\cos\varphi + \hat{S}_x\sin\varphi.$$

2. (a) Chứng minh rằng toán tử $\hat{S}^2$ và $\hat{S}_z$ giao hoán với nhau

(b) Chứng tỏ rằng hệ hàm riêng của $\hat{S}_z$ làm chéo hóa ma trận của toán tử S^2

(c) Tìm trị riêng của toán tử $\hat{S}^2$.

3. Tìm kết quả tác dụng của toán tử $\hat{S}_x + i\hat{S}_y$ và $\hat{S}_x - i\hat{S}_y$ lên các hàm riêng $\left|+\frac{1}{2}\right\rangle$ và $\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$ của $\hat{S}_z$. Nêu ý nghĩa của 2 toán tử này.

4. Xét một hệ gồm 3 hạt đồng nhất không tương tác có cùng trạng thái spin $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}>$. được nhốt trong mọt giếng thế 1 chiều vuông góc sâu vô hạn bề rộng a. Xác định năng lượngvà hàm sóng của hệ ở trạng thái cơ bản, trạng thái kích thích thứ nhất, thứ hai.

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. Sử dụng hệ thức (8.50) và các hệ thức

$$[\hat{S}_z, S_x] = i\hbar S_x,\ [\hat{S}_z, S_y] = -i\hbar S_x,$$

ta được

$$e^{i\hat{S}_z\varphi/\hbar}\hat{S}_x e^{-i\hat{S}_z\varphi/\hbar} = \hat{S}_x + \frac{i\varphi}{\hbar} i\hbar S_y + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\varphi}{\hbar}\right)^2 \hbar^2 S_x + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\varphi}{\hbar}\right)^3 i\hbar^3 S_y + ...$$
$$= \hat{S}_x[1 - \frac{\varphi^2}{2!} + \frac{\varphi 4}{4!} - ...] - \hat{S}_y[1 - \frac{\varphi^3}{3!} + \frac{\varphi 5}{5!} - ...] = \hat{S}_x\cos\varphi - \hat{S}_y\sin\varphi.$$

Tương tự, ta chứng minh được hệ thức thứ hai.

2. (a) Chứng minh $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$: Chứng minh tương tự như chứng minh hệ thức $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ ở chương II.

(b) $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = (\hbar/2)^2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2)$.

Vì $\sigma_i^2 = I$, với ma trận đơn vị

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1. \end{pmatrix}$$

nên

$$\hat{S}^2 = 3\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 I = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Như vậy, ma trận $\hat{S}^2$ bị chéo hóa.

(c) Trị riêng của $\hat{S}^2$ ứng với hàm riêng $\left| +\frac{1}{2}\right\rangle$ là

$$\hat{S}^2\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Tương tự, trị riêng của $\hat{S}^2$ ứng với hàm riêng $\left| -\frac{1}{2}\right\rangle$ là

$$\hat{S}^2\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Như vậy, trị riêng của toán tử $\hat{S}^2$ ứng với hai hàm riêng $\left|\pm\frac{1}{2}\right\rangle$ là như nhau và bằng $3\hbar^2/4$.

3. Tác dụng của toán tử $\hat{S}_x + i\hat{S}_y$ lên $\left|\pm\frac{1}{2}\right\rangle$:

$$(\hat{S}_x + i\hat{S}_y)\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}_x\left|+\frac{1}{2}\right\rangle + i\hat{S}_y\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle + \left(i\frac{\hbar}{2}\right)i\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = 0$$

và

$$(\hat{S}_x+i\hat{S}_y)\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}_x\left|-\frac{1}{2}\right\rangle+i\hat{S}_y\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle+\left(i\frac{\hbar}{2}\right)i\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|+\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Đối với toán tử $\hat{S}_x - i\hat{S}_y$ ta có:

$$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}_x\left|+\frac{1}{2}\right\rangle-i\hat{S}_y\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle-\left(i\frac{\hbar}{2}\right)i\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$$

và

$$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \hat{S}_x\left|-\frac{1}{2}\right\rangle-i\hat{S}_y\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|+\frac{1}{2}\right\rangle-\left(i\frac{\hbar}{2}\right)(-i)\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = 0.$$

Nếu đặt: $\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ và $\hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$ thì

$$\hat{S}_+\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = 0, \quad \hat{S}_-\left|+\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|+\frac{1}{2}\right\rangle, \quad \hat{S}_+\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|+\frac{1}{2}\right\rangle, \quad \hat{S}_-\left|-\frac{1}{2}\right\rangle = 0$$

Ta thấy rằng tóan tử $\hat{S}_+$ tăng spin theo trục z từ $-\hbar/2$ lên $+\hbar/2$ nên được gọi là tóan tử spin nâng (spin-raising), toán tử này tương tự như toán tử mô-men động lượng $\hat{L}_+$. Ngược lại, toán tử $\hat{S}_-$ giảm spin theo trục z từ $+\hbar/2$ xuống $-\hbar/2$ nên được gọi là toán tử spin hạ (spin-lowering), toán tử này tương tự như toán tử mô-men động lượng $\hat{L}_-$.

4 Hàm sóng của hệ hạt đồng nhất Fermion là phản đối xứng. Vì cả 3 hạt cùng trạng thái spin nên không thể có 2 hạt cùng trạng thái vì vậy mỗi mức chỉ chứ 1 hạt.

(i) Trạng thái cơ bản ứng với trường hợp 3 mức thấp nhất bị chiếm $n = 1, 2, 3$ bởi một hạt. Năng lượng và hàm sóng là:

$E^{(0)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 + 9\varepsilon_1 = 14\varepsilon_1 = \frac{7\hbar^2\pi^2}{ma^2}$,

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \psi_1(x_3) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \psi_2(x_3) \\ \psi_3(x_1) & \psi_3(x_2) & \psi_3(x_3) \end{vmatrix}\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle.$$

(ii) Trạng thái kích thích thứ nhất nhận được từ trạng thái cơ bản bằng cách chuyển hạt thứ ba từ mức thứ 3 lên mức thứ 4, như vậy các mức bị chiếm là $n = 1, 2, 4$.
+ Năng lượng ở trạng thái này là: $E^{(1)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_4 = \varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 + 16\varepsilon_1 = 21\varepsilon_1 = \frac{21\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$,
+ Hàm sóng tương ứng:

$$\psi^{(1)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \psi_1(x_3) \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \psi_2(x_3) \\ \psi_4(x_1) & \psi_4(x_2) & \psi_4(x_3) \end{vmatrix} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle.$$

(iii) Trạng thái kích thích thứ hai nhận được từ trạng thái thứ nhất bằng cách chuyển một hạt từ mức thứ 2 lên mức thứ 3, như vậy các mức bị chiếm là $n = 1, 3, 4$.
+ Năng lượng ở trạng thái này là: $E^{(2)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 = \varepsilon_1 + 9\varepsilon_1 + 16\varepsilon_1 = 26\varepsilon_1 = \frac{13\hbar^2\pi^2}{ma^2}$,
+ Hàm sóng tương ứng:

$$\psi^{(2)}(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \psi_1(x_3) \\ \psi_3(x_1) & \psi_3(x_2) & \psi_3(x_3) \\ \psi_4(x_1) & \psi_4(x_2) & \psi_4(x_3) \end{vmatrix} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle.$$

Chương 9

Lý thuyết nhiễu loạn

§ MỤC TIÊU CỦA CHƯƠNG

• Mục tiêu của chương này là khảo sát lý thuyết nhiễu loạn, đó là một trong các phương pháp gần đúng để giải các bài toán thực tế trong cơ học lượng tử. Có hai loại lý thuyết nhiễu loạn được khảo sát chi tiết ở chương này, đó là lý thuyết nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian (nhiễu loạn dừng) và nhiễu loạn phụ thuộc thời gian (nhiễu loạn không dừng). Trong nhiễu loạn dừng ta sẽ khảo sát hai trường hợp, đó là không suy biến và có suy biến. Đối với trường hợp nhiễu loạn không dừng ta sẽ khảo sát xác suất dịch chuyển trạng thái do tác dụng của nhiễu loạn.

• Sau khi học xong chương này, sinh viên sẽ nắm được các ý tưởng về cách giải gần đúng phương trình Schrodinger bằng phương pháp nhiễu loạn. Sinh viên cũng sẽ nắm được lý thuyết cơ bản về các loại nhiễu loạn, từ đó có thể giải được các bài toán đơn giản liên quan đến nhiễu loạn.

§ 1 KHÁI NIỆM VỀ LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN

Trong chương IV chúng ta đã áp dụng phương trình Schrodinger để giải một số bài toán đơn giản (hạt trong hố thế, dao động tử điều hòa, nguyên tử Hydro...). Để giải các bài toán trên ta cũng đã thực hiện một số phép tính khá phức tạp. Tuy nhiên, các bài toán thực tế trong cơ học lượng tử (chẳng hạn

như bài toán về các hệ nguyên tử và hạt nhân, bài toán về chuyển động của electron trong tinh thể...) còn phức tạp hơn nhiều khi số hạng thế năng trong Hamiltonian có dạng phức tạp mà bài toán giải phương trình Schrodinger dừng không giải quyết được. Hơn nữa, khi thế năng phụ thuộc vào thời gian thì lý thuyết phương trình Schrodinger dừng không áp dụng được. Vì vậy, để giải các bài toán này người ta phải dùng các phương pháp gần đúng. Một trong các phương pháp đó là lý thuyết nhiễu loạn.

Ý tưởng của lý thuyết nhiễu loạn là tìm nghiệm gần đúng (trị riêng và hàm riêng) của các hệ thực, không khác nhiều lắm so với nghiệm chính xác của hệ đã lý tưởng hóa. Nếu nhiễu loạn là bé thì năng lượng và hàm trạng thái của hệ nhiễu loạn có thể được biểu diễn dưới dạng các "bổ chính" của hệ chưa nhiễn loạn. Các bổ chính này phải bé so với nghiệm chính xác (ta gọi là bổ chính bậc không).

Ta xét một hệ vi mô có Hamiltonian không phụ thuộc tường minh vào thời gian. Phương trình Schrodinger dừng của hệ có dạng:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \tag{9.1}$$

Giả sử toán tử $\hat{H}$ có thể được tách thành hai thành phần:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}, \tag{9.2}$$

trong đó $\hat{H}_0$ là Hamiltonian hệ không nhiễu loạn, được mô tả bởi phương trình:

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}, \tag{9.3}$$

số hạng $\hat{W}$ diễn tả tác dụng của bên ngoài lên hệ, được gọi là toán tử nhiễu loạn. Toán tử nhiễu loạn có thể là một phần của toán tử Hamilton đã không được xét đến trong bài toán lý tưởng hóa, hay thế năng của các trường ngoài (ví dụ: nguyên tử đặt trong điện trường, từ trường...). Tác dụng của toán tử nhiễu loạn phải được xem là bé so với tác dụng của toán tử không nhiễu loạn $\hat{H}_0$. Nếu toán tử nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian thì gọi là nhiễu loạn dừng, trường hợp ngược lại thì gọi là nhiễu loạn không dừng.

Mục đích của bài toán nhiễu loạn không phụ thuộc thời gian (còn gọi là nhiễu loạn dừng) là tìm biểu thức của năng lượng và các hàm sóng của các trạng thái dừng phụ thuộc vào năng lượng và hàm sóng đã biết của hệ khi chưa có nhiễu loạn. Mục đích của bài toán nhiễu loạn không dừng là tìm xác suất dịch chuyển các trạng thái dưới tác dụng của nhiễu loạn biến thiên theo thời gian, từ đó đưa ra các quy tắc lọc lựa và quy tắc vàng Fermi. Nếu năng lượng $E_n^{(0)}$ trong phương trình (9.3) không suy biến thì được gọi nhiễu loạn được gọi là không suy biến, trường hợp ngược lại được gọi là suy biến.

§ 2 NHIỄU LOẠN KHÔNG PHỤ THUỘC THỜI GIAN

2.1 NHIỄU LOẠN DỪNG KHÔNG SUY BIẾN

Bài toán đặt ra là ta cần giải phương trình

$$(\hat{H}_0 + \hat{W})\psi = E\psi \tag{9.4}$$

khi đã biết nghiệm $E_n^{(0)}$ và $\psi_n^{(0)}$ của phương trình (9.3). Ta xét bài toán trong trường hợp toán tử $\hat{W}$ không phụ thuộc thời gian và năng lượng $E_n^{(0)}$ có phổ rời không suy biến.

Khai triển hàm ψ thành chuỗi theo các hàm $\psi_n^{(0)}$: $\psi = \sum\limits_n c_n\psi_n^{(0)}$ rồi thay vào (9.4), ta được

$$(\hat{H}_0 + \hat{W})\sum_n c_n\psi_n^{(0)} = E\sum_n c_n\psi_n^{(0)}.$$

Nhân vô hướng hai vế phương trình trên cho $\langle\psi_m^{(0)}|$:

$$\begin{aligned}
\langle\psi_m^{(0)}|(\hat{H}_0 + \hat{W})\sum_n c_n\psi_n^{(0)}\rangle &= \langle\psi_m^{(0)}|E\sum_n c_n\psi_n^{(0)}\rangle, \quad \text{hay} \\
\sum_n\langle\psi_m^{(0)}|(\hat{H}_0 + \hat{W})|\psi_n^{(0)}\rangle c_n &= E\sum_n\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle c_n. \qquad (9.5)
\end{aligned}$$

Sử dụng điều kiện trực chuẩn của hàm $\psi_n^{(0)}$ ta được:

$$\sum_n H_{mn}c_n = Ec_m, \tag{9.6}$$

trong đó:

$$H_{mn} = \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_0 + \hat{W}|\psi_n^{(0)}\rangle = \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}_0|\psi_n^{(0)}\rangle + \langle\psi_m^{(0)}|\hat{W}|\psi_n^{(0)}\rangle. \tag{9.7}$$

Trong vế phải của (9.7), số hạng thứ nhất là $E_n^{(0)}\delta_{mn}$, số hạng thứ hai chính là phần tử ma trận của toán tử nhiễu loạn W_{mn}. Như vậy, phương trình (9.6) trở thành:

$$\sum_n (E_n^{(0)}\delta_{mn} + W_{mn})c_n = Ec_m. \tag{9.8}$$

Trong phương trình này, ta tách số hạng $n = m$ trong dấu tổng và viết lại phương trình dưới dạng:

$$(E_m^{(0)} + W_{mn} - E)c_m + \sum_{n\neq m} W_{mn}c_n = 0. \tag{9.9}$$

Ta thấy phương trình (9.9) chính là phương trình (9.4) trong E-biểu diễn.
Để giải phương trình này, ta đặt $\hat{W} = \lambda\hat{V}$, trong đó λ là một thông số bé không có thứ nguyên, được gọi là thông số nhiễu loạn. Phương trình (9.9) bây giờ trở thành:

$$(E_m^{(0)} + \lambda V_{mm} - E)c_m + \lambda\sum_{n\neq m} V_{mn}c_n = 0, \tag{9.10}$$

trong đó phần tử ma trận V có dạng: $V_{mn} = \langle\psi_m^{(0)}|\hat{V}|\psi_n^{(0)}\rangle$
Để giải phương trình (9.10), ta xét mức năng lượng thứ k và khai triển các hệ số c_m và năng lượng E_k thành chuỗi theo thông số nhiễu loạn λ:

$$E_k = E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \ldots; \quad c_m = c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} + \ldots, \tag{9.11}$$

thay vào (9.10), ta được

$$\begin{aligned}(E_m^{(0)} - E_k^{(0)} - \lambda E_k^{(1)} - \lambda^2 E_k^{(2)} + \ldots\lambda V_{mm})(c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} + \ldots \\ + \lambda\sum_{n\neq m} V_{mn}(c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} + \ldots) = 0,\end{aligned} \tag{9.12}$$

gộp các số hạng có cùng bậc luỹ thừa của λ:

$$(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(0)} + \lambda\big[(V_{mm} - E_k^{(1)})c_m^{(0)} + (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(1)} + \sum_{n\neq m} V_{mn}c_n^{(0)}\big]$$
$$+ \lambda^2\big[(V_{mm} - E_k^{(1)})c_m^{(1)} - E_k^{(2)}c_m^{(0)} + (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(2)} + \sum_{n\neq m} V_{mn}c_n^{(1)} + \ldots\big] = 0. \tag{9.13}$$

Ta giải phương trình này bằng phương pháp gần đúng liên tiếp:

a) Phép gần đúng bậc không:

Đây là trường hợp không có nhiễu loạn, $\lambda = 0$, phương trình (9.13) trở thành: $(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(0)} = 0$, hay:

$$E_m^{(0)} = E_k^{(0)} \Rightarrow c_m^{(0)} \neq 0 \text{ và } E_m^{(0)} \neq E_k^{(0)} \Rightarrow c_m^{(0)} = 0, \tag{9.14}$$

từ đó, ta được:

$$c_m^{(0)} = \delta_{mk}. \tag{9.15}$$

b) Phép gần đúng bậc nhất:

Trường hợp này ta có $\lambda \neq 0$, $\lambda^2 = 0$. Thay (9.15) vào (9.10), ta được:

$$(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})\delta_{mk} + (V_{mm} - E_k^{(1)})\delta_{mk} + (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(1)} + \sum_{n\neq m} V_{mn}\delta_{nk} = 0. \tag{9.16}$$

* Để tìm bổ chính năng lượng ta xét trường hợp m = k, lúc đó (9.16) trở thành

$$(V_{kk} - E_k^{(1)}) = 0 \ \rightarrow E_k^{(1)} = V_{kk} = \langle\psi_k^{(0)}|\hat{V}|\psi_k^{(0)}\rangle. \tag{9.17}$$

* Để tìm bổ chính hàm sóng ta xét trường hợp $m \neq k$, lúc đó (9.16) trở thành:

$$(E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(1)} + V_{mk} = 0 \ \rightarrow c_m^{(1)} = \frac{V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}, \ \ m \neq k. \tag{9.18}$$

c) Phép gần đúng bậc hai:

Trường hợp này $\lambda^2 \neq 0$; thay (9.15) và (9.18) vào (9.16) ta được:

$$(V_{mn} - V_{kk})\frac{V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} - E_k^{(2)}\delta_{mk} + (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(2)} + \sum_{n\neq k} V_{mn}\frac{V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} = 0. \tag{9.19}$$

* Để tìm bổ chính năng lượng trong phép gần đúng bậc hai, ta xét trường hợp $m = k$, lúc đó phương trình (9.19) cho ta:

$$E_k^{(2)} = \sum_{n\neq k} \frac{V_{kn}V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} = \sum_{n\neq k} \frac{|V_{kn}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}. \tag{9.20}$$

* Để tìm bổ chính về hàm sóng trong phép gần đúng bậc hai, ta xét trường hợp $m \neq k$, lúc đó từ phương trình (9.19) ta được:

$$(V_{mn} - V_{kk})\frac{V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} + (E_m^{(0)} - E_k^{(0)})c_m^{(2)} + \sum_{n\neq k} \frac{V_{mn}V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} = 0$$

$$(E_m - E_k)c_m^{(2)} = \frac{V_{kk}V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} - \frac{V_{mm}V_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} - \sum_{n\neq k} \frac{V_{mn}V_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Gộp số hạng thứ hai ở vế phải vào dấu tổng theo n (bao gồm n = m), ta có hệ thức của $c_m^{(2)}$:

$$c_m^{(2)} = -\frac{V_{kk}V_{mk}}{(E_k^{(0)} - E_m^{(0)})^2} + \sum_{n\neq k, m\neq k} \frac{V_{mn}V_{nk}}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})(E_k^{(0)} - E_m^{(0)})} \tag{9.21}$$

Kết quả của lý thuyết nhiễu loạn dừng không suy biến là ta được nghiệm của phương trình (9.4) như sau (giới hạn ở phép gần đúng bậc hai):

$$\begin{aligned} E_k &= E_k^{(0)} + \lambda E_k^(1) + \lambda^2 E_k^{(2)} + \ldots \\ &= E_k^{(0)} + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{n\neq k} \frac{|V_{kn}|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} + \ldots \\ &= E_k^{(0)} + W_{kk} + \sum_{n\neq k} \frac{|W_{kn}|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} + \ldots \end{aligned} \tag{9.22}$$

Hàm sóng ứng với năng lượng E_k là:

$$\psi_k = \sum_m c_m \psi_m^{(0)} = C_m^{(0)}\psi_m^{(0)} + \lambda C_m^{(1)}\psi_m^{(0)} + \lambda^2 C_m^{(2)}\psi_m^{(0)} + \ldots$$

Thay các hệ số c_m từ (9.15), (9.18) và (9.21) và lưu ý $\hat{W} = \lambda\hat{V}$, ta được biểu

thức của hàm sóng trong phép gần đúng bậc hai:

$$\begin{aligned}\psi_k &= \psi_k^{(0)} + \sum_{m\neq k} \frac{W_{mk}}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)} \\ &+ \sum_{m\neq k, n\neq k} \frac{W_{mn}W_{nk}}{(E_k^{(0)} - E_m^{(0)})(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})}\psi_m^{(0)} - \sum_{m\neq k} \frac{W_{kk}W_{mk}}{(E_k^{(0)} - E_m^{(0)})^2}\psi_m^{(0)} + \dots\end{aligned} \tag{9.23}$$

Phương pháp nêu trên của lý thuyết nhiễu loạn chỉ ứng dụng được trong trường hợp nếu chuỗi các phép gần đúng liên tiếp hội tụ. Điều này xảy ra khi mỗi số hiệu chính sau phải nhỏ hơn số hiệu chính trước. Như vậy điều kiện để có thể ứng dụng lý thuyết nhiễu loạn có thể viết dưới dạng:

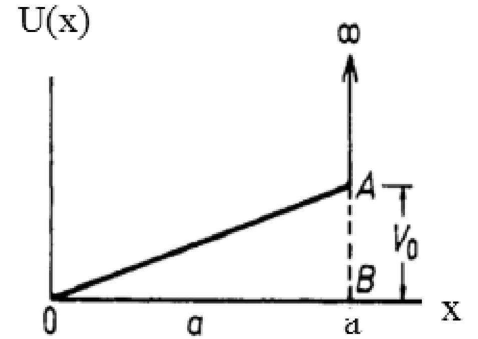
$$|W_{nk}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|. \tag{9.24}$$

Do đó, điều kiện để ứng dụng lý thuyết nhiễu loạn qui về việc đòi hỏi các phần tử ma trận không chéo của toán tử nhiễu loạn phải nhỏ so với giá trị tuyệt đối của hiệu các giá trị tương ứng của năng lượng khi không có nhiễu loạn. **Ví dụ 2.1**:

Trong phép gần đúng bậc nhất của lý thuyết nhiễu loạn, hãy tính năng lượng ứng với ba trạng thái đầu tiên của hạt trong giếng thế bề rộng a bị biến dạng như ở hình vẽ bên.

Bài giải

Theo sơ đồ thế năng ở hình vẽ bên thì giếng thế bị biến dạng bởi tam giác 0AB. Phần biến dạng này được xem là một nhiễu loạn với toán tử nhiễu loạn có dạng: $W = (V_0/a)x$. Năng lượng ứng với ba trạng thái đầu tiên của hạt trong giếng bị biến dạng trong phép gần đúng bậc nhất là:



$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)},\ E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)},\ E_3 = E_3^{(0)} + E_3^{(1)},$$

trong đó ba mức năng lượng đầu tiên khi chưa nhiễu loạn theo bài toán giếng thế là:

$$E_1^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2};\ E_2^{(0)} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2};\ E_3^{(0)} = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

Số hạng bổ chính bậc nhất của năng lượng được tính theo công thức (9.17) là:

$$E_1^{(1)} =< \psi_1^{(0)}|W|\psi_1^{(0)} >,\ E_2^{(1)} =< \psi_2^{(0)}|W|\psi_2^{(0)} >,\ E_3^{(1)} =< \psi_3^{(0)}|W|\psi_3^{(0)} >, \tag{9.25}$$

trong đó

$$\psi_1^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x,\ \psi_2^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x,\ \psi_3^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi}{a}x.$$

Thay dạng của hàm sóng và toán tử nhiễu loạn vào (9.25) ta tính được:

$$E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = E_3^{(0)} = \frac{V_0}{2}.$$

Như vậy, các mức năng lượng cần tìm là:

$$E_1^{(0)} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{V_0}{2};\ E_2^{(0)} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{V_0}{2};\ E_3^{(0)} = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{V_0}{2}.$$

2.2 NHIỄU LOẠN DỪNG CÓ SUY BIẾN

Bây giờ ta giả sử rằng trong phép gần đúng bậc không mức năng lượng $E_n^{(0)}$ suy biến bội f. Khi đó hàm sóng trong phép gần đúng bậc không là tổ hợp tuyến tính của các hàm riêng ứng với các trị riêng suy biến:

$$\psi_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{f} c_{n_i}\psi_{n_i}^{(0)}, \tag{9.26}$$

trong đó hàm $\psi_{n_i}^{(0)}$ là nghiệm của phương trình

$$\hat{H}_0\psi_{n_i}^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_{n_i}^{(0)}, \quad i = 1, 2, 3 \ldots f. \tag{9.27}$$

Tương tự như phần nhiễu loạn dừng không suy biến, để giải phương trình (9.4) ta đặt: $\hat{W} = \lambda\hat{V}$ và thực hiện phép khai triển hàm sóng và năng lượng ứng với

mức thứ n:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)}, \;\; E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}. \tag{9.28}$$

Để thuận tiện cho việc khai triển theo các bậc nhiễu loạn, ta đặt: $\psi_n^{(1)} = \lambda\phi_n, \; E_n^{(1)} = \lambda\varepsilon_n$, lúc đó ta được:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\phi_n, \;\; E_n = E_n^{(0)} + \lambda\varepsilon_n. \tag{9.29}$$

Ta giới hạn ở việc tìm năng lượng trong phép gần đúng bậc nhất và hàm sóng trong phép gần đúng bậc không. Thay (9.29) vào (9.4):

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})(\psi_n^{(0)} + \lambda\phi_n) = (E_n^{(0)} + \lambda\varepsilon_n)(\psi_n^{(0)} + \lambda\phi_n) \tag{9.30}$$

Khai triển các số hạng của biểu thức trên theo bậc luỹ thừa của λ và chỉ giữ lại các số hạng tỉ lệ với luỷ thừa bậc nhất của λ , ta được phương trình:

$$\lambda(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\phi_n = \lambda(\varepsilon_n - \hat{V})\psi_n^{(0)}, \tag{9.31}$$

hay:

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - \hat{W})\psi_n^{(0)}. \tag{9.32}$$

Thay khai triển (9.26) vào (9.32):

$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - \hat{W})\sum_{i=1}^{f} c_{n_i}\psi_{n_i}^{(0)}. \tag{9.33}$$

Nhân vô hướng hai vế của (9.33) cho $\langle\psi_{n_j}^{(0)}|$, ta được:

$$\langle\psi_{n_j}^{(0)}|\hat{H}_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\psi_{n_j}^{(0)}|(E_n^{(1)} - \hat{W})|\sum_{i=1}^{f} c_{n_i}\psi_{n_i}^{(0)}\rangle. \tag{9.34}$$

Ta xét vế trái của (9.34)

$$\langle\psi_{n_j}^{(0)}|\hat{H}_0 - E_n^{(0)})|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\psi_{n_j}^{(0)}|\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle - \langle\psi_{n_j}^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$$

Sử dụng tính chất Hermite của toán tử $\hat{H}_0$ và phương trình (9.27), ta được:

$$\begin{aligned}\langle\psi_{n_j}^{(0)}|\hat{H}_0|\psi_n^{(1)}\rangle &= \langle\hat{H}_0\psi_{n_j}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)}\langle\psi_{n_j}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle \\ \langle\psi_{n_j}^{(0)}|E_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle &= E_n^{(0)}\langle\psi_{n_j}^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle\end{aligned}$$

Do vế trái của (9.34) bằng 0, nên vế phải là:

$$E_n^{(1)}\sum_i c_{n_i}\langle\psi_{n_j}^{(0)}|\psi_{n_j}^{(0)}\rangle - \sum_i\langle\psi_{n_j}^{(0)}|\hat{W}|\psi_{n_j}^{(0)}\rangle c_{n_j} = 0 \tag{9.35}$$

Sử dụng tính chất trực chuẩn của hàm $\psi_{n_i}^{(0)}$, phương trình (9.35) có thể được biến đổi về dạng:

$$E_n^{(1)}c_{n_j} - \sum_i W_{n_jn_i}c_{n_i} = 0,$$

hay

$$(W_{n_jn_j} - E_n^{(1)})c_{n_j} + \sum_{i\neq j} W_{n_jn_i}c_{n_i} = 0. \tag{9.36}$$

Khai triển (9.36) theo các chỉ số i, j, ta được hệ f phương trình tuyến tính bậc nhất:

$$\begin{aligned}(W_{n_1n_1} - E_n^{(1)})c_{n1} + W_{n1n2}c_{n2} + W_{n1n3}c_{n3} + \ldots + W_{n1nf}c_{nf} &= 0 \\ W_{n2n1}c_{n1} + (W_{n2n2} - E_n^{(1)})c_{n2} + W_{n2n3}c_{n3} + \ldots + W_{n2nf}c_{nf} &= 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots &\ \ldots \\ W_{nfn1}c_{n1} + W_{nfn2}c_{n2} + W_{nfn3}c_{n3} + \ldots + (W_{nfnf} - E_n^{(1)})c_{nf} &= 0\end{aligned} \tag{9.37}$$

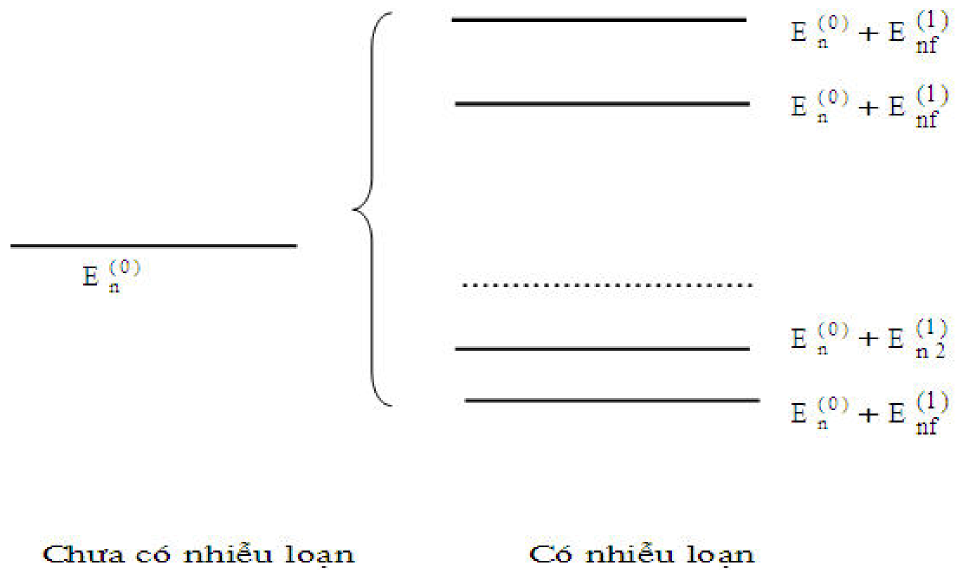
Điều kiện để hệ phương trình (9.37) có nghiệm không tầm thường là định thức của hệ phải bằng không (để đơn giản cách viết bỏ chỉ số n ở phần tử ma trận của toán tử nhiễu loạn và ở các hệ số c_{ni}):

$$\begin{vmatrix} W_{11}-E_n^{(1)} & W_{12} & W_{13} & \dots & \dots & W_{1f} \\ W_{21} & W_{22}-E_n^{(1)} & W_{23} & \dots & \dots & W_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ W_{f1} & W_{f2} & W_{f3} & \dots & \dots & W_{ff}-E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \qquad (9.38)$$

Khai triển định thức này ta được một phương trình bậc f có nghiệm là $E_n^{(1)}$. Như vậy năng lượng của bài toán nhiễu loạn dừng có suy biến trong phép gần đúng bậc nhất là:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}. \qquad (9.39)$$

Trong trường hợp tổng quát phương trình (9.38) có f nghiệm $E_n^{(1)}$, lúc đó mức



Hình 9.1: Minh hoạ sự tách mức năng lượng trong nhiễu loạn dừng suy biến

E_n tách thành f mức con, ta nói nhiễu loạn đã khử suy biến. Nếu f nghiệm này là phân biệt thì ta nói suy biến đã được khử hoàn toàn. Trường hợp có một số nghiệm trùng nhau thì ta nói suy biến bị khử không hoàn toàn (một phần). Sơ đồ các mức năng lượng được minh họa ở Hình 9.1.

Muốn tìm hàm sóng trong phép gần đúng bậc không ta thay các nghiệm $E_n^{(1)}$ vào phương trình (9.37) để tìm các hệ số c_{n_i}. Thay các hệ số này vào khai triển (9.26) ta sẽ được hàm sóng $\psi_n^{(0)}$ trong phép gần đúng bậc không.

Ví dụ 2.2:

Electron trong một giếng thế 3 chiều có năng lượng $E = 3\pi^2\hbar^2/ma^2$. Đặt một điện trường yếu cường độ ϵ dọc theo trục z. Tính bổ chính năng lượng bậc nhất của hạt.

Lời giải

Theo lý thuyết đã cho ở Chương IV, hạt trong giếng thế 3 chiều bề rộng a có năng lượng là: $E = \pi^2\hbar^2(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)/2ma^2$. So sánh với năng lượng đã cho, ta được $(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = 6$, nghĩa là các giá trị khả dĩ của 3 số lượng tử này là:

$$n_x = 1 \;\; n_y = 1 \;\; n_z = 2, \quad n_x = 1 \;\; n_y = 2 \;\; n_z = 1, \quad n_x = 2 \;\; n_y = 1 \;\; n_z = 1.$$

Như vậy mức năng lượng này sẽ suy biến bậc 3. Ta sử dụng hệ phương trình (9.38) để tìm bổ chính năng lượng trong phép gần đúng bậc nhất.

$$\begin{vmatrix} W_{11} - E^{(1)} & W_{12} & W_{13} \\ W_{21} & W_{22} - E^{(1)} & W_{23} \\ W_{31} & W_{32} & W_{33}. \end{vmatrix} = 0 \tag{9.40}$$

Các phần tử ma trận trong (9.40) có dạng:

$$W_{ij} =< \phi_i|\hat{W}|\phi_j > \quad i, j = 1, 2, 3, \tag{9.41}$$

trong đó ta ký hiệu các hàm ϕ_i như sau:

$$\begin{aligned} \phi_1 \equiv \psi_{112} &= \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{\pi y}{a} \sin\frac{2\pi z}{a} \\ \phi_2 \equiv \psi_{121} &= \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\frac{\pi x}{a} \sin\frac{2\pi y}{a} \sin\frac{\pi z}{a} \\ \phi_3 \equiv \psi_{211} &= \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\frac{2\pi x}{a} \sin\frac{\pi y}{a} \sin\frac{\pi z}{a}. \end{aligned}$$

Tính các phần tử ma trận W_{ij} trong (9.41), ta được:

$$W_{11} =< \phi_1|e\varepsilon z|\phi_1 >= \frac{e\varepsilon a}{2} = W_{22} = W_{33}.$$

Các phần tử ma trận không chéo $W_{21} = W_{31} = W_{23} = 0$. Khai triển định thức (9.40), ta tính được: $E^{(1)} = e\varepsilon a/2$. Vậy năng lượng của hạt khi tính đến phép gần đúng bậc nhất là:

$$E' = E + E^{(1)} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2} + \frac{e\varepsilon a}{2}.$$

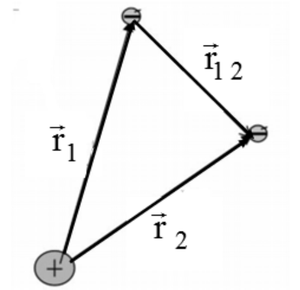
2.3 ỨNG DỤNG CỦA LÝ THUYẾT NHIỄU LOẠN DỪNG

Bây giờ ta sẽ áp dụng lý thuyết vừa trình bày ở trên để khảo sát hai bài toán quen thuộc trong vật lý nguyên tử, đó là bài toán nguyên tử Heli ở trạng thái cơ bản và bài toán nguyên tử Hydro trong điện trường (hiệu ứng Stark). Bài toán đầu áp dụng lý thuyết nhiễu loạn dừng không suy biến trong lúc bài toán sau sử dụng lý thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến.

2.4 TRẠNG THÁI CƠ BẢN CỦA NGUYÊN TỬ HELI VÀ CÁC ION TƯƠNG TỰ

Xét nguyên tử Heli (và các ion tương tự) ở trạng thái cơ bản (n = 1) với mức năng lượng E_1 là không suy biến.

Nguyên tử Heli (và các ion tương tự) là một hệ gồm 2 electron chuyển động trong trường Coulomb của hạt nhân có điện tích Ze (He: Z =2, $Li^+ : Z = 3, Be^{++} : Z = 4...$). Vì khối lượng hạt nhân rất lớn so với khối lượng của electron nên có thể xem hạt nhân là đứng yên. Tọa độ của 2 electron là r_1 và r_2, khoảng cách giữa chúng là r_{12}.



Hình 9.2: Vị trí của 2 electron trong nguyên tử Heli

Để tìm năng lượng và các hàm sóng ta phải giải phương trình:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n, \tag{9.42}$$

trong đó, toán tử $\hat{H}$ là Hamiltonian của hệ 2 electron:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 + U(r_1, r_2), \tag{9.43}$$

trong đó: $U(r_1, r_2) = -\dfrac{Ze^2}{r_1} - \dfrac{Ze^2}{r_2} + \dfrac{e^2}{r_{12}}$

Nếu đặt

$$\hat{H}_{01} = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 - \frac{Ze^2}{r_1}; \;\; \hat{H}_{02} = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2 - \frac{Ze^2}{r_2}; \;\; \hat{W} = \frac{e^2}{r_{12}}$$

Thì phương trình (9.42) có thể viết lại như sau:

$$(\hat{H}_{01} + \hat{H}_{02} + \hat{W})\psi_n = E_n\psi_n \tag{9.44}$$

a) Phép gần đúng bậc không:

Trước hết ta bỏ qua tương tác giữa 2 electron ($\hat{W} = 0$). Phương trình (9.44) trở thành:

$$(\hat{H}_{01} + \hat{H}_{02})\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}, \tag{9.45}$$

trong đó $\psi_n^{(0)}$ là hàm sóng của hệ hai electron không tương tác. Trong hệ toạ độ cầu, hàm sóng này có dạng:

$$\psi_n^{(0)}(r_1, \theta_1, \varphi_1, r_2, \theta_2, \varphi_2) = \psi_{1n}^{(0)}(r_1, \theta_1, \varphi_1)\psi_{2n}^{(0)}(r_2, \theta_2, \varphi_2)$$

ứng với năng lượng có dạng: $E_n^{(0)} = E_{1n}^{(0)} + E_{2n}^{(0)}$. Phương trình (9.45) bây giờ được tách thành hai phương trình:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{01}\psi_{1n}^{(0)} &= E_{1n}^{(0)}\psi_{1n}^{(0)} \\ \hat{H}_{02}\psi_{2n}^{(0)} &= E_{2n}^{(0)}\psi_{2n}^{(0)} \end{aligned} \tag{9.46}$$

Mỗi phương trình ở (9.46) đây mô tả chuyển động của từng electron riêng biệt trong trường hạt nhân của nguyên tử, đó là bài toán ion He^+. Ở trạng thái cơ

bản (n = 1) nghiệm của chúng là:

$$\begin{aligned} E^{(0)}_{1n} = E^{(0)}_{2n} = -\frac{me^4Z^2}{2\hbar^2}, \\ \psi^{(0)}_{11}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}e^{-Zr_1/a_0}, \\ \psi^{(0)}_{12}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}e^{-Zr_2/a_0}. \end{aligned} \quad (9.47)$$

Năng lượng và hàm sóng của nguyên tử Heli là

$$\begin{aligned} E^{(0)}_1 &= 2E^{(0)}_{11} = -\frac{me^4Z^2}{2\hbar^2} = -108,24eV \\ \psi^{(0)}_{100} &= \psi^{(0)}_{11}\psi^{(0)}_{12} = \frac{Z^3}{\pi a_0^3}e^{-Z(r_1+r_2)/a_0} \end{aligned} \quad (9.48)$$

b) Phép gần đúng bậc nhất:

Khi tính đến tương tác giữa hai electron thì bổ chính năng lượng trong phép gần đúng bậc nhất theo (9.17) là

$$E^{(1)}_1 = \langle\psi^{(0)}_{100}|\hat{W}|\rangle\psi^{(0)}_{100}$$

Dạng cụ thể của $E^{(1)}_1$ là

$$E^{(1)}_1 = \int \frac{e^2}{r_{12}}|\psi_{100}|^2 dV_1 dV_2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3}e^2\int \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0}}{r_{12}}dV_1 dV_2; \quad (9.49)$$

trong đó dV_1 và dV_2 là phần tử thể tích trong hệ toạ độ cầu.

Thực hiện phép tính tích phân trên, ta được

$$E^{(1)}_1 = \frac{5me^4}{8\hbar^2}Z,$$

trong đó ta đã thay bán kính Bohr thứ nhất $a_0 = \hbar^2/me^2$.

Vậy năng lượng của nguyên tử Heli và các ion tương tự ở trạng thái cơ bản là:

$$E_1 = E^{(0)}_1 + E^{(1)}_1 = \frac{me^4}{\hbar^2}(Z^2 + \frac{5}{8}Z) \quad (9.50)$$

Đối với nguyên tử Heli thì Z = 2 , ta tính được $E_1 = -74,42$ eV. So sánh với kết quả thu được từ thực nghiệm $E_1 = -78,62$ eV, ta thấy năng lượng của nguyên tử Heli ở trạng thái cơ bản trong phép gần đúng bậc nhất có giá trị phù hợp hơn so với phép gần đúng bậc không.

2.5 HIỆU ỨNG STARK

Hiện tượng tách vạch quang phổ của nguyên tử dưới tác dụng của điện trường được gọi là hiệu ứng Stark. Thực nghiệm chứng tỏ rằng tác dụng của điện trường lên nguyên tử Hydro và các nguyên tử khác thì khác nhau. Trong nguyên tử Hydro sự tách vạch quang phổ tỉ lệ bậc nhất với cường độ điện trường ε. Trong lúc đó, đối với các nguyên tử khác sự tách này tỉ lệ với ε^2. Trong điện trường mạnh ($\propto 10^5$ V/cm) thì sẽ xuất hiện sự tách vạch bổ sung tỉ lệ với luỹ thừa bậc cao của ε. Ngoài ra tuỳ theo mức độ tăng của điện trường, các vạch phổ sẽ mở rộng ra rồi cuối cùng sẽ biến mất. Ta sẽ khảo sát hiệu ứng Stark bậc nhất khi $\varepsilon \leq 10^5$ V/m đối với nguyên tử Hydro. Giá trị điện trường này rất nhỏ so với điện trường ở bên trong nguyên tử $\varepsilon_0 = e/a_0^2 = 5,13.10^9$ V/cm. Vì vậy có thể xem điện trường ngoài này như là một nhiễu loạn: (U'=W). Giả sử điện trường được đặt hướng theo chiều dương của trục z. Dùng công thức quan hệ giữa thế năng và lực ta tính được thế năng tương tác U' giữa electron và điện trường như sau:

$$U' = -\int_0^z F_z dz = -\int_0^z e\varepsilon dz = -e\varepsilon z \tag{9.51}$$

Hamiltonian của nguyên tử Hydro khi ở trong điện trường

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r^2} - e\varepsilon z = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

Ta dùng lý thuyết nhiễu loạn dừng có suy biến để khảo sát hiệu ứng Stark. Ta xét trạng thái ứng với n = 2. Mức năng lượng này suy biến bội 4.

$$n = 2 \to \begin{cases} \ell = 0,\ m = 0 \to \psi_{200}^{(0)} = \psi_{21}^{(0)} \\ \ell = 1, \quad \to \begin{cases} m = \ 0, \ \to \psi_{210}^{(0)} \ = \psi_{22}^{(0)} \\ m = \ 1 \ \to \psi_{211}^{(0)} \ = \psi_{23}^{(0)} \\ m = -1 \to \psi_{21,-1}^{(0)} = \ \psi_{24}^{(0)} \end{cases} \end{cases} \tag{9.52}$$

Áp dụng hệ phương trình (9.37) ta được hệ 4 phương trình sau (để đơn giản ta bỏ chỉ số 2 ở phần tử ma trận của toán tử nhiễu loạn):

$$\begin{aligned} (W_{11} - E_2^{(1)})c_{21} + W_{12}c_{22} + W_{13}c_{23} + W_{14}c_{24} &= 0 \\ W_{21}c_{21} + (W_{22} - E_2^{(1)})c_{22} + W_{23}c_{23} + W_{24}c_{24} &= 0 \\ W_{31}c_{21} + W_{32}c_{22} + (W_{33} - E_2^{(1)})c_{23} + W_{34}c_{24} &= 0 \\ W_{41}c_{21} + W_{42}c_{22} + W_{43}c_{23} + (W_{44} - E_2^{(1)}))c_{24} &= 0 \end{aligned} \tag{9.53}$$

Ta tính các phần tử ma trận:

$$W_{njni} = \int_V \psi_{nj}^{(0)} |\hat{W}| \psi_{ni}^{(0)} dV \tag{9.54}$$

Theo kết quả của bài toán trường xuyên tâm, dạng tường minh của các hàm sóng trong toạ độ cầu là:

$$\begin{aligned} \psi_{200} &= R_{20}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) &= \psi_{21}^{(0)} \\ \psi_{210} &= R_{21}(r)Y_{10}(\theta, \varphi) &= \psi_{22}^{(0)} \\ \psi_{211} &= R_{21}(r)Y_{11}(\theta, \varphi) &= \psi_{23}^{(0)} \\ \psi_{21,-1} &= R_{21}(r)Y_{1,-1}(\theta, \varphi) &= \psi_{24}^{(0)} \end{aligned} \tag{9.55}$$

Dạng của các hàm cầu là

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}};\ Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta;\ Y_{0,\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

Dạng của các hàm bán kính là:

$$R_{20}(r) = 2(\frac{Z}{2a_0})^{3/2}(1 - \frac{Zr}{2a_0})e^{-Zr/2a_0}; \quad R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{Z}{2a_0})^{3/2}\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/2a_0}$$

Nếu để ý đến hệ thức liên hệ giữa toạ độ cầu và toạ độ Descarters:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi; \quad y = r\sin\theta\sin\varphi; \; z = r\cos\theta$$

Các hàm trong (9.55) có thể biến đổi về dạng:

$$\begin{aligned} \psi_{21}^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{20} = f(r); \\ \psi_{22}^{(0)} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}R_{21}\frac{Z}{r} = F(r)z; \\ \psi_{23}^{(0)} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}\frac{x+iy}{r} = F(r)\frac{x+iy}{r}; \\ \psi_{24}^{(0)} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}\frac{x-iy}{r} = F(r)\frac{x-iy}{r}; \end{aligned} \tag{9.56}$$

Dạng cụ thể của f(r) và F(r) là:

$$f(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}e^{-\frac{r}{2a_0}}(1 - \frac{r}{2a_0}); F(r) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{1}{\sqrt{6a_0^3}}e^{-\frac{r}{2a_0}}\frac{r}{2a_0} \tag{9.57}$$

Do tính chất chẵn lẻ của hàm dưới dấu tích phân đối với z nên khi thay các hàm (9.56) vào tích phân (9.54) ta thấy tất cả các phần tử ma trận đều bằng không, ngoại trừ hai phần tử $W_{12} = W_{21}$.

Ta tính phần tử ma trận: $W_{12} = W_{21} = -e\varepsilon \int f(r)F(r)z^2 dV$. Thay dạng của f(r) và F(r) vào ta được:

$$W_{12} = -\frac{e\varepsilon\sqrt{3}}{4\pi}\frac{1}{\sqrt{12}}\frac{1}{a_0^3}\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-r/2a_0}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\frac{e^{-r/2a_0}}{r}\frac{r}{2a_0}z^2r^2 dr\sin\theta d\theta d\varphi. \tag{9.58}$$

Ta có:

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} z^2 \sin\theta d\theta d\varphi = r^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} z^2\cos^2\theta\sin\theta d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{3}r^2$$

Để tính phần còn lại của tích phân ta đưa vào biến số mới $\xi = \frac{r}{a_0}$ và cuối cùng ta được:

$$W_{12} = W_{21} = -\frac{e\varepsilon a_0}{12}\int_0^\infty e^{-\xi}\left(1 - \frac{\xi}{2}\right)\xi^4 d\xi = 3e\varepsilon a_0. \quad (9.59)$$

Lưu ý rằng để đơn giản trong phép tính tích phân ta có thể sử dụng tính chất của hàm Gamma với định nghĩa: $\Gamma(n) = \int x^{n-1}e^{-x}dx$. Giá trị của hàm Gamma đối với các giá trị n bất kỳ có thể tìm thấy trong các tài liệu về các hàm đặc biệt. Hệ phương trình (9.53) bây giờ trở thành

$$\begin{aligned} -E_2^{(1)}c_{21} + 3e\varepsilon a_0 c_{22} &= 0 \\ 3e\varepsilon a_0 c_{21} - E_2^{(1)}c_{22} &= 0 \\ -E_2^{(1)}c_{23} &= 0 \\ -E_2^{(1)}c_{24} &= 0. \end{aligned} \quad (9.60)$$

Định thức tương ứng của hệ là:

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & 3e\varepsilon a_0 & 0 & 0 \\ 3e\varepsilon a_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)}. \end{vmatrix} = 0 \quad (9.61)$$

Khai triển định thức này ta được phương trình

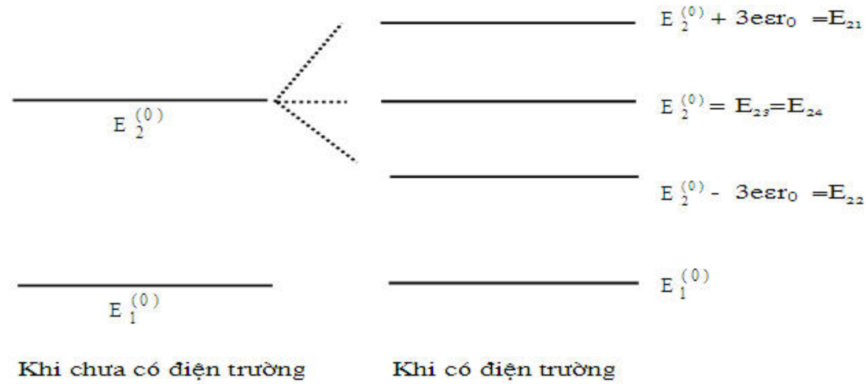
$$(E_2^{(1)})^2[(E_2^{(1)})^2 - (3e\varepsilon a_0)^2] = 0.$$

Nghiệm của phương trình này là:

$$\begin{aligned} E_{21}^{(1)} &= +3e\varepsilon a_0 \quad , \quad E_{22}^{(1)} = -3e\varepsilon a_0, \\ E_{23}^{(1)} &= 0 \qquad\quad , \quad E_{24}^{(1)} = 0. \end{aligned} \quad (9.62)$$

Như vậy trong phép gần đúng bậc bậc nhất, năng lượng của electron trong nguyên tử Hydro khi đặt trong điện trường là:

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_{2f}^{(1)} \quad f = 1, 2, 3, 4. \quad (9.63)$$



Hình 9.3: Sơ đồ biểu diễn sự tách các mức năng lượng của nguyên tử Hydro trong điện trường

Ta thấy, mức năng lượng $E_2^{(0)}$ của electron trong nguyên tử khi đặt trong điện trường bị tách thành 3 mức con (hình 9.3) .

Bây giờ ta tính các hàm sóng trong phép gần đúng bậc bậc không ứng với các mức năng lượng $E_{21}, E_{22}, E_{23}, E_{24}$ (Hình 9.3). Muốn vậy ta phải xác định các hệ số $c_{21}, c_{22}, c_{23}, c_{24}$ từ hệ phương trình (9.60):

a) Khi $E_{21}^{(1)} = +3e\varepsilon a_0$, hệ phương trình trở thành:

$$\begin{aligned} -3e\varepsilon a_0 c_{21} + 3e\varepsilon a_0 c_{22} &= 0 \\ 3e\varepsilon a_0 c_{21} - 3e\varepsilon a_0 c_{22} &= 0 \\ -3e\varepsilon a_0 c_{23} &= 0 \\ -3e\varepsilon a_0 c_{24} &= 0. \end{aligned} \tag{9.64}$$

Nghiệm của hệ này là: $c_{21} = c_{22}; c_{23} = c_{24} = 0$

Hàm sóng trong phép gần đúng bậc không ứng với mức E_{21} là:

$$\psi_2^{(0)} = c_{21}\psi_{21}^{(0)} + c_{22}\psi_{22}^{(0)} = c(\psi_{21}^{(0)} + \psi_{22}^{(0)}).$$

Dùng điều kiện chuẩn hoá ta tính được $c = 1/\sqrt{2}$.

b) Khi $E_{22}^{(1)} = -3e\varepsilon a_0$, hệ phương trình trở thành:

$$\begin{aligned} 3e\varepsilon a_0 c_{21} + 3e\varepsilon a_0 c_{22} &= 0 \\ 3e\varepsilon a_0 c_{21} + 3e\varepsilon a_0 c_{22} &= 0 \\ 3e\varepsilon a_0 c_{23} &= 0 \\ 3e\varepsilon a_0 c_{24} &= 0. \end{aligned} \tag{9.65}$$

Nghiệm của hệ này là: $c_{21} = -c_{22}; c_{23} = c_{24} = 0$

Hàm sóng trong phép gần đúng bậc không ứng với mức E_{22} là:

$$\psi_2^{(0)} = c_{21}\psi_{21}^{(0)} - c_{22}\psi_{22}^{(0)} = c(\psi_{21}^{(0)} - \psi_{22}^{(0)}).$$

Dùng điều kiện chuẩn hoá ta tính được $c = 1/\sqrt{2}$.

c) Khi $E_{23}^{(1)} = E_{24}^{(1)} = 0$, hệ phương trình trở thành:

$$\begin{aligned} 0c_{21} + 3e\varepsilon a_0 c_{22} &= 0 \\ 3e\varepsilon a_0 c_{21} + 0c_{22} &= 0 \\ 0c_{23} &= 0 \\ 0c_{24} &= 0. \end{aligned} \tag{9.66}$$

Nghiệm của hệ này là: $c_{21} = c_{22} = 0; c_{23},\ c_{24}$ bất kỳ.

Hàm sóng trong phép gần đúng bậc không ứng với mức E_{23} và E_{24} là:

$$\psi_3^{(0)} = \psi_4^{(0)} = c_{23}\psi_{23}^{(0)} + c_{24}\psi_{24}^{(0)}.$$

§ 3 NHIỄU LOẠN KHÔNG DỪNG

Bây giờ ta xét hệ lượng tử chịu tác dụng của nhiễu loạn phụ thuộc thời gian W = W(t). Hamiltonian của hệ có thể được tách thành hai phần:

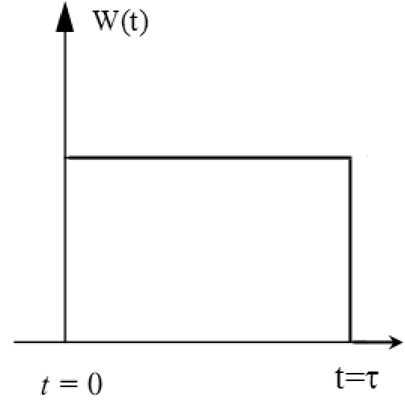
$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{W}(t), \tag{9.67}$$

trong đó H_0 là thành phần Hamiltonian không phụ thuộc thời gian, mô tả hệ khi chưa bị nhiễu loạn, $\hat{W}(t)$ là thành phần nhiễu loạn phụ thuộc thời gian. Thế nhiễu loạn $W(t)$ có thể là hàm bậc thang có dạng:

$$\hat{W}(t) = \begin{cases} \hat{W}(t), & 0 \le t \le \tau \\ 0, & t \le 0, \quad t > \tau. \end{cases} \tag{9.68}$$

hoặc thế điều hòa. Hình 9.4 mô tả dạng thế nhiễu loạn hình bậc thang. Hamiltonian $H(t)$ thỏa mãn phương trình Schrodinger tổng quát:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{W}(t))\Psi(x,t), \tag{9.69}$$



Hình 9.4: Sự phụ thuộc thời gian của thế nhiễu loạn hình bậc thang

trong đó nghiệm của phương trình Schrodinger của hệ chưa nhiễu loạn

$$i\hbar\frac{\partial\psi_k^{(0)}(x,t)}{\partial t} = \hat{H}_0\psi_k^{(0)}(x,t) \tag{9.70}$$

đã biết dưới dạng nghiệm của trạng thái dừng:

$$\psi_k^{(0)}(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}\psi_k^{(0)}(x). \tag{9.71}$$

Ta tìm nghiệm của (9.69) bằng phương pháp biến thiên hằng số (lý thuyết nhiễu loạn Dirac). Khai triển hàm $\Psi(x,t)$ thành chuỗi theo các hàm $\psi_k^{(0)}(x,t)$:

$$\Psi(x,t) = \sum_k c_k(t)\psi_k^{(0)}(x,t)$$

Thay vào (9.69) ta được:

$$i\hbar\sum_k\left\{\frac{\partial c_k(t)}{\partial t}\psi_k^{(0)}(x,t) + c_k(t)\frac{\partial\psi_k^{(0)}(x,t)}{\partial t}\right\} = (\hat{H}_0 + \hat{W}(t))\sum_k c_k(t)\psi_k^{(0)}(x,t) \tag{9.72}$$

Nhân vô hướng hai vế của (9.72) cho $\langle\psi_m^{(0)}(x,t)|$

$$\begin{aligned} i\hbar\sum_k\left\{\frac{\partial c_k(t)}{\partial t}\langle\psi_m^{(0)}(x,t)|\psi_k^{(0)}(x,t)\rangle + c_k(t)\langle\psi_m^{(0)}(x,t)|\frac{\partial\psi_k^{(0)}(x,t)}{\partial t}\rangle\right\} = \\ = \sum_k\left\{\langle\psi_m^{(0)}(x,t)|\hat{H}_0|\psi_k^{(0)}(x,t)\rangle + \langle\psi_m^{(0)}(x,t)|\hat{W}|\psi_k^{(0)}(x,t)\rangle\right\}c_k(t) \end{aligned} \tag{9.73}$$

Ta thấy số hạng thứ hai của vế trái và số hạng thứ nhất của vế phải của phương trình (9.73) bằng nhau, vì vậy phương trình này trở thành:

$$i\hbar\sum_k \frac{dc_k(t)}{dt}\delta_{mk}e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_k)t} = \sum_k W_{mk}e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_k)t}c_k(t)$$

hay

$$i\hbar\sum_k \frac{dc_m(t)}{dt} = \sum_k W_{mk}e^{i\omega_{mk}t}c_k(t), \text{ trong đó } \omega_{mk} = (E_m - E_k)/\hbar. \qquad (9.74)$$

Phương trình (9.74) có vế phải chứa hệ số phụ thuộc thời gian $c_k(t)$ mà ta cần phải tìm. Thông thường ta giải phương trình này phương pháp lặp:

* Giả thuyết tại thời điểm $t \leq 0$ hệ ở trạng thái $\Psi(x,0) = \psi_n^{(0)}(x)$, Lúc đó ta tìm được hệ số $c_k(t)$ trong khai triển: $\Psi(x,0) = \sum_k c_k(t)\psi_k^{(0)}(x,t)$

Hệ số của khai triển là: $c_k(t) = \langle\psi_k^{(0)}(x,t)|\Psi(x,0)\rangle$. Từ đó ta tìm được:

$$c_k(0) = \langle\psi_k^{(0)}(x,0)|\psi_n^{(0)}(x,0)\rangle = \delta_{kn}. \qquad (9.75)$$

* Bắt đầu thời điểm $t \geq 0$ hệ bắt đầu chịu tác dụng của nhiễu loạn, lúc đó hàm $\Psi(x,t)$ sẽ thay đổi theo thời gian. Ta viết hệ số $c_k(t)$ dưới dạng chuỗi:

$$c_k(t) = c_k^{(0)}(t) + c_k^{(1)}(t) + c_k^{(2)}(t) + \ldots \qquad (9.76)$$

và $W_{mk} = \lambda V_{mk}$.

Thay (9.76) vào (9.74), ta được:

$$\begin{aligned} &i\hbar\frac{d}{dt}\left[c_m^{(0)}(t) + c_m^{(1)}(t) + c_m^{(2)}(t) + \ldots\right] \\ &= \sum_k \lambda V_{mk}e^{i\omega_{mk}t}[c_k^{(0)}(t) + c_k^{(1)}(t) + c_k^{(2)}(t) + \ldots]. \end{aligned} \qquad (9.77)$$

Từ đó ta được

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}[c_m^{(0)}(t)] &= 0 \qquad (a) \\ i\hbar\frac{d}{dt}[c_m^{(1)}(t)] &= \sum_k W_{mk}e^{i\omega_{mk}t}c_k^{(0)}(t) \ (b) \\ i\hbar\frac{d}{dt}[c_m^{(2)}(t)] &= \sum_k W_{mk}e^{i\omega_{mk}t}c_k^{(1)}(t). \ (c) \end{aligned} \qquad (9.78)$$

Vì $c_k^{(0)}(t) = \delta_{nk}$, nên phương trình (b) và (c) của hệ phương trình (9.78) có thể viết lại như sau:

$$i\hbar\frac{d}{dt}[c_m^{(1)}(t)] = \sum_k W_{mk}e^{i\omega_{mk}t}\delta_{nk} = W_{mn}e^{i\omega_{mn}t}\ (b)$$

Giải phương trình này ta được:

$$c_m^{(1)}(t)] = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t W_{mn}e^{i\omega_{mn}t'}dt'. \qquad (9.79)$$

Tương tự

$$c_m^{(2)}(t)] = \frac{1}{i\hbar}\sum_k \int_0^t W_{mn}e^{i\omega_{mk}t'}c_k^{(1)}dt'. \qquad (9.80)$$

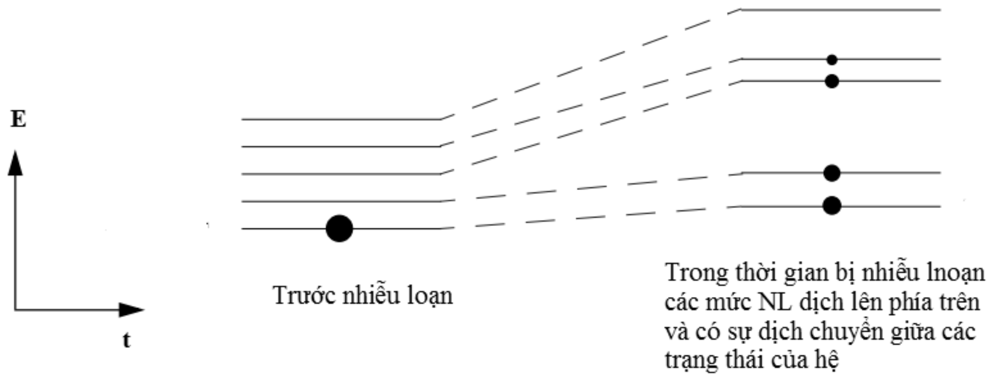
Biết các hệ số $c_m^{(0)}, c_m^{(1)}, c_m^{(2)}$...ta sẽ biết được hàm sóng của hệ vào thời điểm t. Một ứng dụng quan trọng của kết quả này là việc tính xác suất chuyển dời lượng tử khi có nhiễu loạn.

§ 4 SỰ CHUYỂN DỜI LƯỢNG TỬ DƯỚI ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỄU LOẠN

4.1 KHÁI NIỆM VỀ SỰ CHUYỂN DỜI LƯỢNG TỬ

Một trong những bài toán quan trọng của cơ học lượng tử là tính xác suất chuyển dời từ một trạng thái lượng tử này sang một trạng thái lượng tử khác. Sự dịch chuyển này xảy ra do ảnh hưởng của nhiễu loạn phụ thuộc thời gian. Sự dịch chuyển này chỉ có ý nghĩa khi nhiễu loạn tác dụng trong một khoảng thời gian hữu hạn (ví dụ từ 0 đến τ). Ngoài khoảng thời gian này, hệ ở trạng thái dừng có năng lượng xác định. Bài toán này có thể được mô tả như sau (Hình 9.5):

+ Trước khi có tác dụng của nhiễu loạn $W(t)$: Hệ ở trạng thái dừng có năng lượng xác định $E = E_n$ tương ứng với trạng thái $\Psi(x, 0) = \psi_n(x)$, thỏa mãn phương trình $\hat{H}_0\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$.



Hình 9.5: Minh họa sự dịch chuyển của các mức năng lượng do ảnh hưởng của nhiễu loạn không dừng

+ Trong thời gian có tác dụng của nhiễu loạn $W(t)$: Do ảnh hưởng của nhiễu loạn hệ chuyển sang trạng thái mới với hàm sóng $\Psi(x,t)$. Sự thay đổi theo thời gian của thế nhiễu loạn gây ra sự dịch chuyển các mức năng lượng của trạng thái ban đầu và sự chuyển giữa các trạng thái của hệ chưa nhiễu loạn.

+ Sau khi ngắt nhiễu loạn $W(t)$:

Sau khi nhiễu loạn bị ngắt, hệ sẽ trở về trạng thái ban đầu. Trạng thái của hệ bây giờ là chồng chất của các trạng thái không nhiễu loạn của hệ, tuy nhiên hệ số $c_m(t)$ bây giờ phụ thuộc vào dạng của toán tử nhiễu loạn và trạng thái ban đầu. Trạng thái cuối của hệ được mô tả bởi hàm sóng dạng:

$$\Psi_f(x,t) = \sum_m c_m(t)\psi_m e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} \tag{9.81}$$

ứng với năng lượng E_m. Xác suất đo được E_m chính là bình phương mô đun của hệ số khai triển trong (9.81). Đây cũng chính là xác suất để hệ chuyển từ trạng thái có năng lượng E_n sang trạng thái có năng lượng E_m trong khoảng thời gian t.

4.2 XÁC SUẤT CHUYỂN DỜI LƯỢNG TỬ

Ta gọi xác suất của sự chuyển từ trạng thái n (sau đây gọi là trạng thái đầu $|i\rangle$) sang trạng thái m (gọi là trạng thái cuối $|f\rangle$) là $P_{fi}(t)$ [1] thì:

$$P_{fi}(t) = |c_f(t)|^2 = |c_{fi}(t)|^2 \qquad (9.82)$$

Ta tìm xác suất này trong phép gần đúng bậc nhất:

$$P_{fi}(t) = |c_f(t)|^2 = |c_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t W_{fi} e^{i\omega_{fi}t'} dt'\right|^2 \qquad (9.83)$$

Ta xét hai trường hợp cụ thể sau:

a) Nhiễu loạn không đổi

Giả sử $\hat{W}(t)$ không đổi trong khoảng thời gian hữu hạn $0 \leq t \leq \tau$ (Hình 9.4). Trong trường hợp này phần tử ma trận W_{fi} = const, tích phân (9.83) được tính như sau:

$$\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}\tau} d\tau\right|^2 = \left|\frac{1}{i\omega_{fi}}(e^{i\omega_{fi}t} - 1)\right|^2.$$

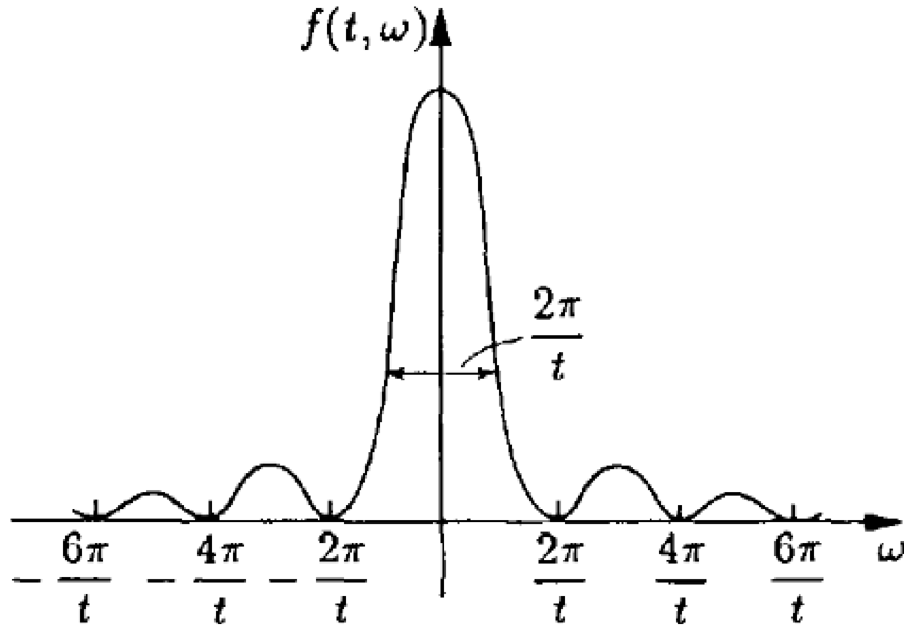
Với lưu ý $|e^{i\omega_{fi}t} - 1|^2 = 4\sin^2\frac{\omega_{fi}t}{2}$, ta tính được:

$$P_{fi}(t) = \frac{4|W_{fi}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}^2}. \qquad (9.84)$$

Từ biểu thức trên ta thấy rằng xác suất P_{fi} là một hàm tuần hoàn với chu kỳ $2\pi/\omega_{fi}$. Tuy nhiên, như được biểu diễn ở đồ thị hình 9.6, xác suất này có giá trị lớn ở lân cận $\omega_{fi} \simeq 0$ và giảm nhanh khi ω_{fi} đi ra xa giá trị không. Điều này có nghĩa là xác suất tìm thấy hệ ở trạng thái $|\psi_f>$ có năng lượng E_f lớn nhất khi $E_i \simeq E_f$ nghĩa là khi $\omega_{fi} \simeq 0$.

Chiều cao và độ rộng của cực đại chính tập trung quanh $\omega_{fi} = 0$ lần lượt tỉ lệ với t^2 và $1/t$, vì vậy diện tích miền ở dưới đường cong tỉ lệ với t. Như vậy

[1] Để tiện cho SV tham khảo các tài liệu nước ngoài, chúng tôi dùng ký hiệu i thay cho initial (ban đầu) và f thay cho final (cuối cùng)



Hình 9.6: Đồ thị của $f(t,\omega) = \sin^2(\omega_{fi}t/2)]/\omega_{fi}^2$ theo ω_{fi}, trong đó ta đã ký hiệu $\omega \equiv \omega_{fi}$.

xác suất dịch chuyển tỉ lệ với t. Ta cũng nhận thấy rằng cực đại chính trở nên hẹp và cao hơn khi t lớn. Đây chính là tính chất của hàm Delta. Dựa vào dạng lượng giác của hàm Delta

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(yt)}{\pi y^2 t} = \delta(y), \tag{9.85}$$

ta thực hiện biến đổi sau:

$$\frac{\sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}^2} = \frac{(\pi t/4)\sin^2(\omega_{fi}t/2)}{\pi(\omega_{fi}/2)^2 t} = (\pi t/4)\frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi\alpha t},$$

trong đó ta đã đặt $\alpha = \omega_{fi}/2$. Như vậy khi $t \to \infty$, thì

$$\lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi\alpha t} = \delta(\alpha). \tag{9.86}$$

Biểu thức của xác suất chuyển dời bây giờ có dạng

$$\begin{aligned} P_{fi}(t) &= \frac{4}{\hbar^2}|W_{fi}|^2\frac{\pi t}{2}\delta\left(\frac{E_f - E_i}{\hbar}\right) \\ &= \frac{2\pi t}{\hbar}|W_{fi}|^2\delta(E_f - E_i), \end{aligned} \quad (9.87)$$

trong đó ta đã sử dụng tính chất của hàm Delta: $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$.

Ta định nghĩa tốc độ dịch chuyển là xác suất dịch chuyển trong một đơn vị thời gian thì

$$\Gamma_{fi} = \frac{P_{fi}}{t} = \frac{2\pi}{\hbar}|W_{fi}|^2\delta(E_f - E_i). \quad (9.88)$$

Hàm Delta $\delta(E_f - E_i)$ đảm bảo sự bảo toàn năng lượng, điều này có nghĩa là khi $t \to \infty$ tốc độ dịch chuyển khác không chỉ đối với các trạng thái có năng lượng bằng nhau. Như vậy, nhiễu loạn không đổi không lấy năng lượng của hệ và cũng không cung cấp năng lượng cho hệ mà nó chỉ gây ra sự dịch chuyển bảo toàn năng lượng.

Để tính xác suất chuyển từ trạng thái $|i\rangle$ đến tất cả các trạng thái khác thì ta lấy tổng biểu thức (9.87) theo các giá trị khả dĩ của f

$$P = \sum_f P_{fi}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar}\sum_f |W_{fi}|^2\delta(E_f - E_i) \quad (9.89)$$

Nếu các trạng thái cuối có phổ liên tục, ta gọi $\rho(E_f)$ là mật độ của trạng thái cuối, nghĩa là số trạng thái trên một đơn vị năng lượng , lúc đó tốc độ dịch chuyển toàn phần nhận được từ (9.88) là

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\int |W_{fi}|^2\delta(E_f - E_i)dE_f = \frac{2\pi}{\hbar}|W_{fi}|^2\rho(E_f). \quad (9.90)$$

Hệ thức này được gọi là quy tắc vàng Fermi (Fermi golden rule). Quy tắc này chỉ ra rằng trong trường hợp nhiễu loạn bậc nhất, tốc độ dịch chuyển chỉ phụ thuộc bình phương của phần tử ma trận của toán tử nhiễu loạn giữa trạng thái đầu và trạng thái cuối và điều kiện bảo toàn năng lượng.

b) Nhiễu loạn tuần hoàn

Bây giờ ta giả sử toán tử nhiễu loạn phụ thuộc tuần hoàn vào thời gian có dạng: $\hat{W}(t) = \hat{V}e^{+i\omega t} + \hat{V}^{\dagger}e^{-i\omega t}$, trong đó $\hat{V}$ là toán tử độc lập thời gian. Loại nhiễu loạn này làm cho hệ chuyển từ trạng thái dừng này sang trạng thái dừng khác.

Xác suất chuyển hệ từ trạng thái ban đầu $|i\rangle$ đến trạng thái cuối $|f\rangle$ theo (9.83) có dạng

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle\int_0^t e^{i(\omega_{fi}+\omega)t'}dt' + \langle\psi_f|\hat{V}^{\dagger}|\psi_i\rangle\int_0^t e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'}dt'\right|^2. \quad (9.91)$$

Thực hiện các phép tính tích phân của biểu thức trên, ta được

$$P_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar^2}|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle|^2\left|\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}-1}{\omega_{fi}+\omega}\right|^2 + \frac{1}{\hbar^2}\left|\langle\psi_f|\hat{V}^{\dagger}|\psi_i\rangle\right|^2\left|\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}-1}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2. \quad (9.92)$$

Sử dụng hệ thức $|e^{i\theta}-1|^2 = 4\sin^2(\theta/2)$, ta được

$$\begin{aligned} P_{fi}(t) = \frac{4}{\hbar^2}\big[&|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle|^2\frac{\sin^2 i((\omega_{fi}+\omega)t/2)}{(\omega_{fi}+\omega)^2} \\ &+ |\langle\psi_f|\hat{V}^{\dagger}|\psi_i\rangle|^2\frac{\sin^2 i((\omega_{fi}-\omega)t/2)}{(\omega_{fi}-\omega)^2}\big]. \end{aligned} \quad (9.93)$$

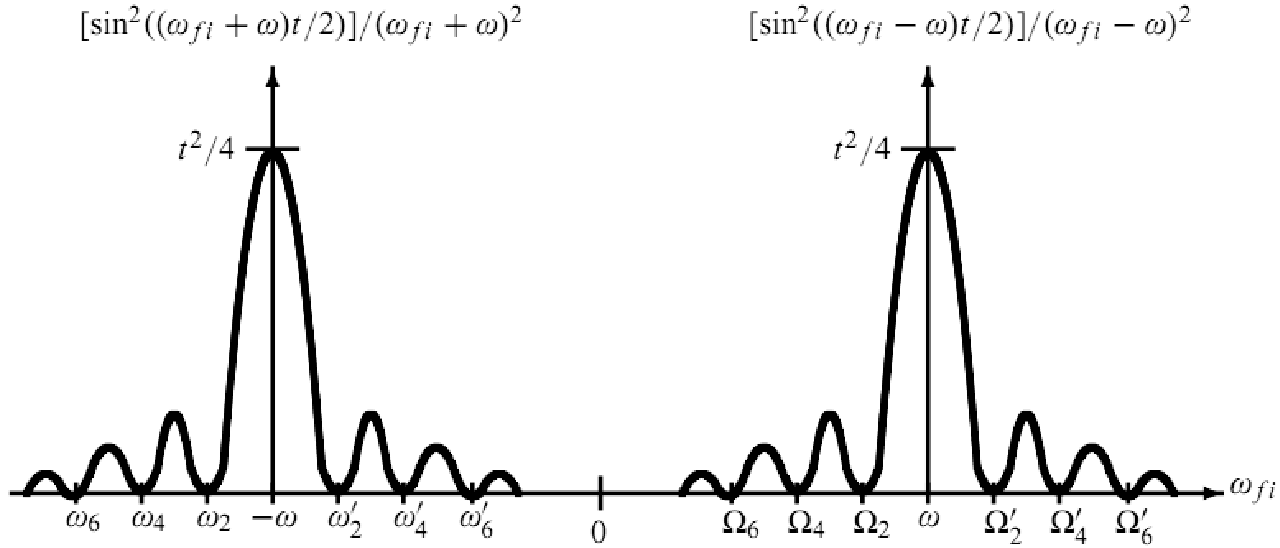
Khảo sát bằng đồ thị biểu thức (9.93) ta thấy rằng xác suất dịch chuyển có đỉnh tại $\omega_{fi} = -\omega$ với giá trị cực đại là $P_{fi}(t) = (t^2/4\hbar^2)|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle|^2$, hoặc tại $\omega_{fi} = \omega$ với giá trị cực đại là $P_{fi}(t) = (t^2/4\hbar^2)|\langle\psi_f|\hat{V}^{\dagger}|\psi_i\rangle|^2$. Đây là các điều kiện cộng hưởng, nghĩa là xác suất dịch chuyển lớn nhất chỉ trong trường hợp tần số trường nhiễu loạn gần bằng $\pm\omega_{fi}$. Khi ω khác xa $\pm\omega fi$ thì xác suất P_{fi} giảm nhanh (Hình 9.7).

Trong trường hợp $t \to \infty$ thì như đã thực hiện ở biểu thức (9.84), sử dụng công thức (9.86) cho (9.93), ta được biểu thức cho tốc độ dịch chuyển

$$\Gamma_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\psi_f|\hat{V}|\psi_i\rangle\right|^2\delta(E_f-E_i+\hbar\omega)+\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\psi_f|\hat{V}^{\dagger}|\psi_i\rangle\right|^2\delta(E_f-E_i-\hbar\omega). \quad (9.94)$$

Tốc độ dịch chuyển này khác không khi một trong hai biểu thức sau đây được thỏa mãn

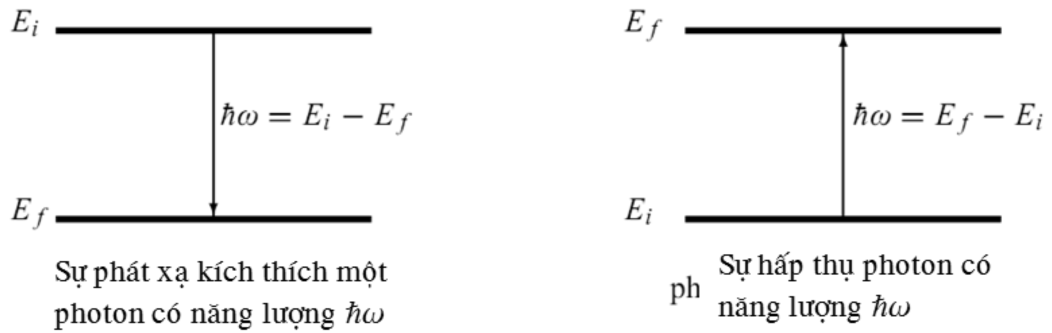
$$E_f = E_i - \hbar\omega, \quad (9.95)$$



Hình 9.7: Đồ thị của $[\sin^2((\omega_{fi} \pm \omega)t/2)]/(\omega_{fi} \pm \omega)^2$ theo ω_{fi} với các giá trị t xác định, trong đó $\omega_n = -\omega - n\pi/t$, $\omega'_n = \omega + n\pi/t$, $\Omega_n = \omega - n\pi/t$, $\Omega'_n = \omega + n\pi/t$.

$$E_f = E_i + \hbar\omega. \tag{9.96}$$

Hai điều kiện này không thể đồng thời được thỏa mãn. Ta có thể giải thích ý



Hình 9.8: Sự phát xạ và hấp thụ một photon có năng lượng $\hbar\omega$.

nghĩa vật lý của điều này như sau:

Điều kiện $E_f = E_i - \hbar\omega$ chứng tỏ rằng hệ ban đầu ở trạng thái kích thích vì

năng lượng của trạng thái cuối nhỏ hơn năng lượng trạng thái đầu. Khi có tác động của nhiễu loạn, hệ giảm kích thích bằng cách truyền cho thế nhiễu loạn $\hat{W}(t)$ một photon có năng lượng $\hbar\omega$ (Hình 9.8). Quá trình này được gọi là phát xạ kích thích vì hệ dễ dàng phát xạ một photon có năng lượng $\hbar\omega$. Điều kiện $E_f = E_i + \hbar\omega$ chứng tỏ rằng năng lượng của trạng thái ban đầu nhỏ hơn năng lượng trạng thái cuối. Khi có tác động của nhiễu loạn, hệ sẽ hấp thụ một photon có năng lượng $\hbar\omega$ từ thế nhiễu loạn $\hat{W}(t)$. Quá trình này được gọi là phát xạ kích thích vì hệ dễ dàng phát xạ một photon có năng lượng $\hbar\omega$ và chuyển qua trạng thái kích thích có năng lượng là E_f.

Tóm lại, trong nhiễu loạn tuần hoàn, thế nhiễu loạn hoặc là hấp thụ một photon năng lượng $\hbar\omega$ từ hệ hoặc là truyền cho hệ một photon. Ngược lại, trong nhiễu loạn không đổi theo thời gian không xảy ra sự mất năng lượng của hệ hoặc truyền năng lượng cho hệ.

Ví dụ 4.1:

Hạt ở trong giếng thế một chiều vuông góc sâu vô hạn có thành tại x=0 và x=a. Ban đầu hạt ở trạng thái cơ bản, sau đó hạt chịu một nhiễu loạn $V(t) = x^2 e^{-t/\tau}$. Trong phép gần đúng bậc nhất, hãy tính xác suất tìm hạt ở trạng thái kích thích thứ nhất cho trường hợp $t \geq 0$.

Lời giải:

Năng lượng và hàm sóng của hạt trong giếng thế đã cho là:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad \psi_{\mathrm{n}}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

Xác suất tìm hạt ở trạng thái kích thích thứ nhất chính là xác suất dịch chuyển hạt từ trạng thái đầu $|\psi_1>$ đến trạng thái cuối $|\psi_2>$:

$$P_{21} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\infty <\psi_2|V(t)|\psi_1> e^{i\omega_{21}t}dt\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|<\psi_2|x^2|\psi_1>|^2\left|\int_0^\infty e^{-(\frac{1}{\tau}-i\omega_{21})t}dt\right|^2$$

Tính ra: $< \psi_2|x^2|\psi_1 >= -16a^2/9\pi^2$, thay vào biểu thức của xác suất, ta được:

$$\left|\int\limits_0^\infty e^{-(\frac{1}{\tau}-i\omega_{12})t}dt\right|^2 = \left|\frac{e^{-(\frac{1}{\tau}-i\omega_{21})t}-1}{\frac{1}{\tau}-i\omega_{21}}\right|^2 = \frac{1+e^{-2t/\tau}-2e^{-t/\tau}\cos(\omega_{21}t)}{\omega_{21}^2+1/\tau^2},$$

lấy giới hạn biểu thức trên khi $t\to\infty$ và lưu ý $\omega_{21}=(E_2-E_1)/\hbar = 3\pi^2\hbar/(2ma^2)$, ta được

$$\left|\int\limits_0^\infty e^{-(\frac{1}{\tau}-i\omega_{12})t}dt\right|^2 = \left[\omega_{21}^2+\frac{1}{\tau^2}\right]^{-1} = \left[\frac{9\pi^4\hbar^2}{4m^2a^4}+\frac{1}{\tau^2}\right]^{-1}.$$

Cuối cùng ta được kết quả:

$$P_{21} = \left(\frac{16a^2}{9\pi^2\hbar}\right)^2\left[\frac{9\pi^4\hbar^2}{4m^2a^4}+\frac{1}{\tau^2}\right]^{-1}. \qquad (9.97)$$

§ 5 TÓM TẮT CHƯƠNG 9

- Lý thuyết nhiễu loạn là một trong các phép gần đúng để giải các bài toán thực tế của cơ học lượng tử khi Hamiltonian của hệ thực tế không khác xa nhiều so với hệ lý tưởng:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

  , trong đó toán tử nhiễu loạn $\hat{W}$ được giả sử là bé so với $\hat{H}_0$. Lý thuyết này dựa trên ý tưởng là nghiệm của bài toán thực tế được biểu diễn thành chuỗi theo nghiệm của bài toán lý tưởng mà nghiệm chính xác đã biết.

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \ldots; \qquad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \ldots.$$

- Trong trường hợp nhiễu loạn dừng không suy biến, các bổ chính của năng lượng và hàm sóng được cho lần lượt ở công thức (9.22) và (9.23).

- Đối với nhiễu loạn dừng có suy biến ta chỉ khảo sát trường hợp bổ chính năng lượng bậc nhất $E_n^{(1)}$ mà biểu thức của nó có thể tìm được bằng cách giải hệ phương trình (9.38).

- Một trong những bài toán quan trọng của cơ học lượng tử là tính xác suất chuyển dời từ một trạng thái lượng tử này sang một trạng thái lượng tử khác. Sự dịch chuyển này xảy ra do ảnh hưởng của nhiễu loạn phụ thuộc thời gian. Sự dịch chuyển này chỉ có ý nghĩa khi nhiễu loạn tác dụng trong một khoảng thời gian hữu hạn.
  Nếu nhiễu loạn không đổi trong thời gian tác dụng lên hệ, ta tính xác suất dịch chuyển theo công thức (9.90), công thức này chính là quy tắc vàng Fermi quen thuộc trong vật lý.
  Trong trường hợp nhiễu loạn tuần hoàn thì tốc độ dịch chuyển được tính theo công thức (9.94). Công thức này mô tả sự hấp thụ hoặc phát xạ một photon của hệ do ảnh hưởng của nhiễu loạn.

§ 6 BÀI TẬP CHƯƠNG 9

1. Tính bổ chính năng lượng của trạng thái thứ n trong phép gần đúng bậc nhất của hạt trong hố thế một chiều vuông góc sâu vô hạn bề rộng 2L, với thành giếng ở $x = 0$ và $x = L$ bị thay đổi ở đáy bởi các thế nhiễu loạn sau:

   (a) $V_p(x) = \lambda V_0 \sin(\pi x/2L)$

   (b) $V_p(x) = \lambda V_0 \delta(x - L)$.

2. Hạt trong giếng thế 2 chiều vuông góc sâu vô hạn bề rộng $L_x = L_y = L$. Tác dụng vào giếng một nhiễu loạn bé dạng

   $$V(x, y) = V_0 L^2 \delta(x - x_0)\delta(y - y_0).$$

   (a) Tính bổ chính năng lượng trong phép gần đúng bậc nhất ở trạng thái cơ bản

   (b) Tìm năng lượng của hạt ở trạng thái kích thích thứ nhất. Cho $x_0 = y_0 = L/4$.

3. Hạt có điện tích q trong giếng thế 3 chiều mỗi cạnh đều bằng L có năng

lượng là $3\pi^2\hbar^2/mL^2$. Đặt vào hệ một điện trường yếu có cường độ ε theo trục z. Tìm bổ chính bậc nhất của năng lượng.

4. Một hạt có điện tích dao động điều hòa một chiều theo trục x với tần số ω_x. Tại thời điểm $t = 0$ hạt ở trạng thái cơ bản $n = 0$. Tác dụng vào hệ một thế nhiễu loạn dạng $V(t) = -q\varepsilon x$ trong khoảng thời gian $0 \leq t \leq \tau$, với ε là cường độ điện trường. Trong phép gần đúng bậc nhất hãy tìm xác suất dịch chuyển hạt sang trạng thái $n = 1$.

HƯỚNG DẪN GIẢI VÀ ĐÁP SỐ

1. Năng lượng và hàm sóng trong phép gần đúng bậc không chính là nghiệm của bài toán không nhiễu loạn:

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{8mL^2}; \quad \psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{2L}\right). \tag{9.98}$$

Bổ chính năng lượng trong phép gần đúng bậc nhất là:

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|V_p(x)|\psi_n^{(0)}\rangle = \frac{1}{L}\int_0^{2L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{2L}\right)V_p(x)dx.$$

(a) Với $V_p(x) = \lambda V_0\sin(\pi x/2L)$, ta được

$$E_n^{(1)} = \frac{\lambda V_0}{L}\int_0^{2L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{2L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{2L}\right)dx.$$

Áp dụng công thức hạn bậc của hàm sin^2x, ta tính được

$$E_n^{(1)} = \frac{2\lambda V_0}{\pi}\frac{4n^2}{4n^2-1}.$$

(b) Trường hợp $V_p(x) = \lambda V_0\delta(x-L)$, ta có

$$E_n^{(1)} = \frac{\lambda V_0}{L}\int_0^{2L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{2L}\right)\delta(x-L)dx = \frac{\lambda V_0}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right).$$

Tính ra ta được:

$$E_n^{(1)} = \begin{cases} 0, & \text{khi n chẵn;} \\ \lambda V_0/L, & \text{khi n lẻ.} \end{cases}$$

2. Năng lượng và hàm sóng của hạt trong phép gần đúng bậc không là:

$$E_{n_x n_y} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2 + n_y^2); \psi^{(0)}_{\mathrm{n_x} n_y}(x,y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi n_x}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi n_y}{L}y\right).$$

Ở trạng thái cơ bản ($n_x = 1, n_y = 1$) năng lượng của hạt không suy biến, ta áp dụng nhiễu loạn dừng không suy biến để tìm bổ chính năng lượng trong phép gần đúng bậc nhất

$$E^{(1)}_{11} =< \psi^{(0)}_{11}|V|\psi^{(0)}_{11} >$$
$$= \frac{4}{L^2}\int_0^L\int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y}{L}\right) V_0 L^2 \delta(x-x_0)\delta(y-y_0)dxdy$$

Tính ra ta được

$$E^{(1)}_{11} = 4V_0\sin^2\left(\frac{\pi x_0}{L}\right)\sin^2\left(\frac{\pi y_0}{L}\right).$$

(b) Ở trạng thái kích thích thứ nhất năng lượng suy biến bội 2. Năng lượng $E_{12} = E_{21} = \frac{5\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, ứng với hai trạng thái

$$\psi_{12}(x) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right) \equiv \psi_0^{(1)};$$
$$\psi_{21}(x) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \equiv \psi_0^{(2)}.$$

Sử dụng công thức (9.38), ta được

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0.$$

Tính 4 phần tử phần tử ma trận của toán tử nhiễu loạn khi $x_0 = y_0 = L/4$ đều cho kết quả là $2V_0$. Thay vào định thức trên ta được:

$$2V_0\begin{vmatrix} 1 - E^{(1)} & 1 \\ 1 & 1 - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0.$$

Giải ra ta được: $E_1^{(1)} = 0, E_1^{(2)} = 4V_0$.

Năng lượng của hạt trong phép gần đúng bậc nhất là

$$E_{12} = \begin{cases} 5\pi^2\hbar^2/2mL \\ (5\pi^2\hbar^2/2mL) + 4V_0 \end{cases}$$

3. Năng lượng và hàm sóng của hạt trong giếng thế 3 chiều có dạng:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2}, \psi_{\mathrm{n_x} n_y n_z}(x, y.z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \backslash \sin\left(\frac{\pi x n_x}{L}\right) \backslash \sin\left(\frac{\pi y n_y}{L}\right) \backslash \sin\left(\frac{\pi z n_z}{L}\right),$$

trong đó $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. So sánh với giá trị năng lượng đã cho, ta thấy $n^2 = 6$, từ đó các giá trị khả dĩ của n_x, n_y, n_z là:

$$(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 2); \quad (n_x, n_y, n_z) = (1, 2, 1); \quad (n_x, n_y, n_z) = (2, 1, 1).$$

Như vậy, năng lượng suy biện bội 3, Các trạng thái tương ứng là:

$$\begin{aligned} \psi_{112}(x, y.z) &= \sqrt{\tfrac{8}{L^3}} \sin\left(\tfrac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\tfrac{\pi y}{L}\right) \sin\left(\tfrac{2\pi z}{L}\right) \equiv \psi_1^{(0)}, \\ \psi_{121}(x, y.z) &= \sqrt{\tfrac{8}{L^3}} \sin\left(\tfrac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\tfrac{2\pi y}{L}\right) \sin\left(\tfrac{\pi z}{L}\right) \equiv \psi_2^{(0)}, \\ \psi_{211}(x, y.z) &= \sqrt{\tfrac{8}{L^3}} \sin\left(\tfrac{2\pi x}{L}\right) \sin\left(\tfrac{\pi y}{L}\right) \sin\left(\tfrac{\pi z}{L}\right) \equiv \psi_3^{(0)}. \end{aligned}$$

Tương tự như bài 3, sử dụng công thức (9.38), ta được

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} - -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0.$$

Tính 4 phần tử phần tử ma trận của toán tử nhiễu loạn ta được

$$V_{11} =< \psi_{_1}^{(0)} | q\varepsilon z | \psi_{_1}^{(0)} >= q\varepsilon < \psi_{_1}^{(0)} | z | \psi_{_1}^{(0)} >= ... = q\varepsilon L/2.$$

Tương tự

$$V_{22} = q\varepsilon < \psi_{_2}^{(0)} | z | \psi_2^{(0)} >= q\varepsilon L/2, V_{33} = q\varepsilon < \psi_{_3}^{(0)} | z | \psi_3^{(0)} >= q\varepsilon L/2.$$

$$\begin{aligned} &V_{12} = V_{21} =< \psi_{_1}^{(0)} | q\varepsilon z | \psi_2^{(0)} >= q\varepsilon < \psi_{_1}^{(0)} | z | \psi_2^{(0)} >= ... = 0 \\ &V_{23} = V_{32} = q\varepsilon < \psi_{_2}^{(0)} | z | \psi_3^{(0)} >= 0, V_{13} = V_{31} = q\varepsilon < \psi_{_3}^{(0)} | z | \psi_3^{(0)} >= 0 \end{aligned}$$

Thay vào định thức trên ta được:

$$q\varepsilon L/2 \begin{vmatrix} 1-E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 1-E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 1-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0.$$

Giải ra ta được: $E_1^{(1)} = E_2^{(1)} = E_3^{(1)} = q\varepsilon L/2$.

4. Xác suất dịch chuyển hạt từ trạng thái $|0>$ sang trạng thái $|1>$ là:

$$P_{10}(\tau) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau <\psi_1|V|\psi_0> e^{i\omega_{10}t}dt\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau e^{i\omega_{10}t}dt\right|^2 |<\psi_1|V|\psi_0>|^2.$$

Tính phần tử ma trận $<\psi_1|V|\psi_0>$ với

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}e^{-x^2/2x_0^2}, \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}}\frac{2x}{x_0}e^{-x^2/2x_0^2},$$

trong đó $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_x}$, ta được

$$<\psi_1|V|\psi_0>= -q\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_x}}.$$

Thay vào biểu thức của $P_{10}(\tau)$, ta có kết quả.

$$P_{10}(\tau) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau e^{i\omega_{10}t}\left(-q\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{10}}}\right)dt\right|^2 = ... = \frac{(q\varepsilon)^2}{2m\hbar\omega_x}\left[\frac{\backslash\sin(\omega_x\tau/2)}{\omega_x/2}\right]^2,$$

trong đó ta đã thay $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar = \omega_x$.

PHẦN PHỤ LỤC

P1. Hàm Delta-Dirac

1. Định nghĩa: Hàm Delta do Dirac đưa ra trong công trình "Những nguyên lý của cơ học lượng tử" và sau đó được sử dụng rộng rãi trong vật lý. Hàm Delta được ký hiệu là $\delta(x)$ và được định nghĩa như sau:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0) \tag{9.99}$$

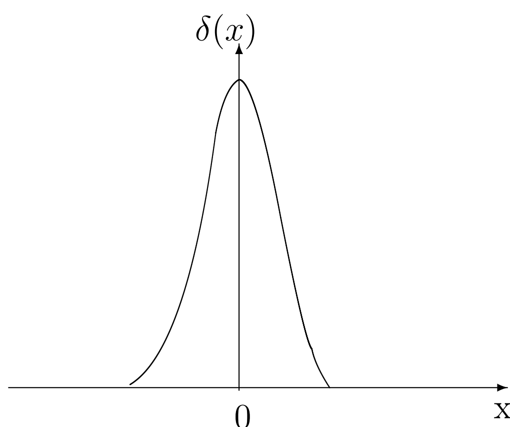
Trong đó $\delta(x)$ có dạng:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{nếu } x \neq 0 \\ \infty, & \text{nếu } x = 0 \end{cases} \tag{9.100}$$

Và thỏa mãn điều kiện:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1 \tag{9.101}$$

Có thể hình dung đồ thị của một hàm giống như hàm $\delta(x)$, biểu diễn trên hình P.1. Nếu miền nằm bên trái và bên phải trục tung được làm hẹp lại thì phải tăng chiều cao của đường cong lên thế nào để diện tích của đường cong giới hạn bởi đồ thị và trục hoành vẫn giữ nguyên giá trị bằng 1 đã cho của nó.



Hình P.1: Đồ thị của hàm Delta-Dirac

Nếu ta đổi từ biến $x \to x - x_0$ thì công thức (9.102) trở thành

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0) \tag{9.102}$$

Và

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0, & \text{nếu } x \neq x_0 \\ \infty, & \text{nếu } x = x_0 \end{cases} \tag{9.103}$$

2. Dạng lượng giác của hàm Delta: Có thể chứng minh rằng hàm $\delta(x)$ tương đương với giới hạn sau:

$$\delta(x) = \lim \frac{\sin(Lx)}{\pi x} \quad \text{khi } L \to \infty \tag{9.104}$$

Từ (9.104) ta có thể suy ra dạng lượng giác của hàm $\delta(x)$ như sau

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixk}dk \quad \text{hay } \delta(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}dx \tag{9.105}$$

Trong trường hợp 3 chiều thì hàm $\delta(\vec{r})$ được xác định như sau:

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$$

Dạng lượng giác của hàm này là

$$\delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\vec{k}} e^{i\vec{r}\vec{k}}d\vec{k} \quad \text{hay } \delta(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}}d\vec{r} \tag{9.106}$$

3. Các tính chất của hàm Delta: Có thể chứng minh các tính chất sau của hàm Delta:

$$\delta(x) = \delta(-x) \qquad \text{Hay } \delta(x - x_0) = \delta(x_0 - x) \tag{9.107}$$

$$x\delta(x) = 0 \qquad \text{Hay } (x - x_0)\delta(x - x_0) = 0 \tag{9.108}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \qquad \text{Hay } \delta[a(x - x_0)] = \frac{1}{|a|}\delta(x - x_0) \tag{9.109}$$

P2. Một số tích phân quan trọng

1. Tích phân Poisson:

Trong các bài tập cơ học lượng tử ta thường gặp các tích phân dạng:

$$I_{2n} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n}e^{-\alpha x^2}dx \tag{9.110}$$

Và

$$I_{2n+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx \tag{9.111}$$

Để tích các tích phân này, trước hết ta tính tích phân dạng:

$$I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx \tag{9.112}$$

Muốn vậy, trước hết ta xét tích phân:

$$I_0^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha y^2} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha(x^2+y^2)} dx dy$$

Chuyển tích phân này sang toạ độ cực: $x = r\cos\varphi, y = r\sin\varphi$, ta được:

$$I_0^2 = \int_{r=0}^{+\infty} \int_{\varphi=0}^{2\pi} e^{-\alpha r^2} r dr d\varphi = 2\pi \int_0^{\infty} e^{-\alpha r^2} r dr = \pi/\alpha \tag{9.113}$$

Từ đó:

$$I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi/\alpha} \tag{9.114}$$

Nếu lấy đạo hàm của I_0 theo α và sử dụng kết quả của (9.114) ta được:

$$\frac{\partial I_0}{\partial \alpha} = -\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\partial}{\partial \alpha}\sqrt{\pi/a} = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \tag{9.115}$$

Như vậy:

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} \tag{9.116}$$

Tương tự, lấy đạo hàm theo α của I_2, ta được:

$$I_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\partial I_2}{\partial \alpha} = \frac{1.3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}} \tag{9.117}$$

Tổng quát, ta có tích phân Poisson dạng (9.110):

$$I_{2n} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}} \tag{9.118}$$

Trong đó ký hiệu $(2n-1)!! = 1.3.5.7...$ chỉ tích các số lẻ liên tiếp.

Đối với tích phân dạng (9.111) ta để ý rằng hàm dưới dấu tích phân là hàm lẻ của x nên tích phân theo x từ $-\infty$ đến $+\infty$ sẽ bằng 0:

$$I_{2n+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\alpha x^2} dx = 0 \tag{9.119}$$

2. Tích phân dạng: $I_n = \int_0^\infty e^{-\beta x} x^n dx$*:*

Để tính tích phân này, trước hết ta tính tích phân:

$$I_0 = \int_0^\infty e^{-\beta x} dx = 1/\beta \tag{9.120}$$

Lấy đạo hàm tích phân I_0 theo β:

$$\frac{\partial I_0}{\partial \beta} = -\int_0^\infty x e^{-\beta x} dx = -1/\beta^2$$

Như vậy:

$$I_1 = \int_0^\infty x e^{-\beta x} dx = 1/\beta^2 \tag{9.121}$$

Tương tự, lấy tiếp đạo hàm theo β của I_1, ta được:

$$I_2 = \int_0^\infty x^2 e^{-\beta x} dx = 2/\beta^3 \tag{9.122}$$

Tiếp tục quá trình, cuối cùng ta được:

$$I_n = \int_0^\infty x^n e^{-\beta x} dx = \frac{n!}{\beta^{n+1}} \tag{9.123}$$

P3: Đa thức Hermite

Phương trình vi phân

$$\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + 2ny = 0 \tag{9.124}$$

có nghiệm được biểu diễn dưới dạng một đa thức được gọi là đa thức Hermite và có dạng

$$\begin{aligned} y(x) &= H_n(x) = (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2x)^{n-4} + \dots \\ &= (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{x^{-2}} \quad \text{với } n = 0, 1, 2, 3.... \end{aligned} \tag{9.125}$$

Chẳng hạn: $H_0(x) = 1; H_1x) = 2x; H_2(x) = 4x^2 - 2; ....$

Đa thức Hermite thoả mãn hệ thức trực giao sau

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2(x)dx = \sqrt{\pi}2^n n!$$

Các công thức truy toán:

$$xH_n(x) = nH_{n-1}(x) + \frac{1}{2}H_{n+1}(x) \quad (9.126)$$

$$xH_{n-1}(x) = (n-1)H_{n-2}(x) + \frac{1}{2}H_n(x) \quad (9.127)$$

$$xH_{n+1}(x) = (n+1)H_n(x) + \frac{1}{2}H_{n+2}(x) \quad (9.128)$$

P4. Đa thức Legendre

Phương trình vi phân:

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + \ell(\ell+1)y = 0 \quad (9.129)$$

có nghiệm được biểu diễn dưới dạng một đa thức được gọi là đa thức Legendre và có dạng:

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell \quad \text{trong đó } : \ell = 0, 1, 2, ... \text{ và } -1 \leq x \leq 1 \quad (9.130)$$

Chẳng hạn:

$$P_0(x) = 1; P_1(x) = x; P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1)$$

Đa thức Legendre thoả mãn hệ thức trực giao sau:

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x)P_{\ell'}dx = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'}$$

Công thức truy toán:

$$P_\ell = \frac{2\ell-1}{1}P_{\ell-1} - \frac{\ell-1}{2}P_{\ell-2}$$

Trong cơ học lượng tử người ta thường dùng dạng mở rộng của đa thức (9.130) được gọi là đa thức Legendre liên kết, và có dạng:

$$P_\ell(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{d^m P_\ell(x)}{dx^m}$$

Đa thức này chính là nghiệm của phương trình Lengendre liên kết:

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + \left[(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y = 0 \quad \text{trong đó } m = 0; \pm1; \pm2; ... \pm \ell \tag{9.131}$$

Hệ thức trực giao:

$$\int_{-1}^{1} P_\ell^m(x) P_{\ell'}^m dx = \frac{2(\ell+m)!}{(2\ell+1)(\ell-m)!}\delta_{\ell\ell'}$$

P5: Đa thức Lageurre

Phương trình vi phân dạng

$$x\frac{d^2L_k(x)}{dx^2} + (1-x)\frac{dL_k(x)}{dx} + kL_k(x) = 0 \tag{9.132}$$

có nghiệm là một đa thức của x, được gọi là đa thức Lageurre

$$L_k(x) = e^x \frac{d}{dx}(x^k e^{-x}) \tag{9.133}$$

Chẳng hạn

$$L_0(x) = 1; L_1(x) = 1 - x; L_2(x) = 2 - 4x + x^2, ...$$

Nếu lấy đạo hàm hạng j của $L_k(x)$ theo x thì ta được đa thức $L_k^j(x)$ và được gọi là đa thức Lageurre liên kết:

$$L_k^j(x) = \frac{d^j}{dx^j}\left(e^x \frac{d}{dx}(x^k e^{-x})\right) \tag{9.134}$$

Đa thức này chính là nghiệm của phương trình Lageurre liên kết

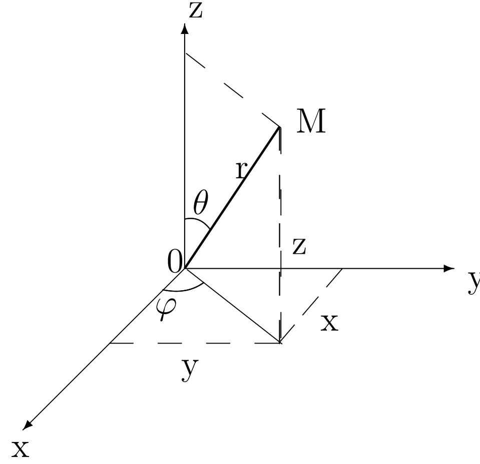
$$x\frac{d^2L_k^j(x)}{dx^2} + (j+1-x)\frac{dL_k^j(x)}{dx} + kL_k^j(x) = 0 \tag{9.135}$$

Hệ thức trực giao:

$$\int_0^\infty L_k^j(x) L_{k'}^j(x) x^j dx = \frac{(k!)^3}{(k-j)!}\delta_{kk'}$$

P6: Sự chuyển từ hệ toạ độ Descartes sang hệ tọa độ cầu

Trong hệ toạ độ vuông góc, vị trí của một điểm M được biểu diễn bởi 3 toạ độ x, y, z, trong lúc đó trong hệ toạ độ cầu 3 toạ độ đó là r, θ, φ.



Ta có quan hệ giữa các toạ độ vuông góc và toạ độ cầu như sau:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{9.136}$$

Phần tử thể tích trong toạ độ cầu là: $dV = r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$, trong đó $\sin\theta d\theta d\varphi = d\Omega$ là phần tử góc khối (góc đặc)

Ngược lại

$$\begin{aligned} r &= (x^2+y^2+z^2)^{1/2} \\ \theta &= \arccos z(x^2+y^2+z^2)^{-1/2} \\ \varphi &= \arctan(y/x) \end{aligned} \tag{9.137}$$

Xét một hàm $f(x,y,z)$ trong hệ toạ độ vuông góc, nếu thay x,y,z bằng các biểu thức trong (9.136) thì ta được hàm f phụ thuộc vào các toạ độ cầu r,θ,φ. Bây giờ ta tính đạo hàm của $f(r,\theta,\varphi)$ theo các toạ độ x, y, z.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial x} \tag{9.138}$$

Ta phải tính các đạo hàm riêng:

$$\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial \theta}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

Các đạo hàm này có thể tính được như sau:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{x}{r} = \sin\theta\cos\varphi \\
\frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{xz}{\sqrt{x^2+y^2}(x^2+y^2+z^2)} = \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi \\
\frac{\partial \varphi}{\partial x} &= \frac{y}{x^2+y^2} = -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}
\end{aligned} \tag{9.139}$$

Tương tự:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial r}{\partial y} &= \sin\theta\sin\varphi; \qquad \frac{\partial r}{\partial z} = \cos\theta \\
\frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{1}{r}\cos\theta\sin\varphi; \qquad \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{r}\sin\theta \\
\frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{\cos\theta}{r\sin\theta}; \qquad \frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0
\end{aligned} \tag{9.140}$$

Thay các đạo hàm ở (9.139) và (9.140) vào (9.138), ta được

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}$$

Tương tự, ta tính được biểu thức của $\frac{\partial f}{\partial y}$ và $\frac{\partial f}{\partial z}$ theo các toạ độ góc.

Bây giờ ta tính dạng của của toán tử Laplace trong toạ độ cầu.Trong hệ toạ độ vuông góc, toán tử này có dạng:

$$\Delta f = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) f$$

Chuyển sang hệ toạ độ cầu, ta được

$$\Delta f = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial f}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \tag{9.141}$$

Như vậy toán tử Laplace trong hệ toạ độ cầu có thể viết như sau

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi} \tag{9.142}$$

Trong đó Δ_r là phần bán kính của Δ và có dạng

$$\Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) \tag{9.143}$$

Còn $\Delta_{\theta,\varphi}$ được gọi là phần góc và có dạng:

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{9.144}$$

P7: Bảng chữ cái Hy Lạp

A	α	Alpha	B	β	Beta	Γ	γ	Gamma	Δ	δ	Delta
E	ϵ	Epsilon	Z	ζ	Zeta	H	η	Eta	Θ	θ	Theta
I	ι	Iota	K	κ	Kappa	Λ	λ	Lambda	M	μ	Mu
N	ν	Nu	Ξ	ξ	Xi	O	o	Omicron	Π	π	Pi
P	ρ	Rho	$\sum$	σ	Sigma	T	τ	Tau	Υ	υ	Upsilon
Φ	ϕ	Phi	X	χ	Chi	Ψ	ψ	Psi	Ω	ω	Omega

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Nguyễn Hoàng Phương, "Nhập môn Cơ học Lượng tử - Cơ sở và Phương pháp", NXB Giáo dục, 1998.
2. Phạm Quý Tư và Đỗ Đình Thanh, "Cơ học Lượng tử "(Tái bản lần 1), NXB ĐHQG Hà Nội, 2003.
3. Davydov, A. S. , "Quantum Mechanics", Translated from the Russian by D. Ter Haar, Pergamon Press, 1965.
4. Fitts, Donald D. ,"Principles of Quantum Mechanics: as Applied to Chemistry and Chemical Physics", Cambridge University Press, 2002.
5. Griffith, David J., "Introduction to Quantum Mechanics"(2nd Edition), Pearson Education, Inc., 2005.
6. Krane, K., "Modern Physics", John Wiley & Sons, New York, 1983.
7. Landau, L. D. and Lifshitz, E. M., "Quantum Mechanics - Non-relativistic Theory"(3r edition), Translated from the Russian by J. B. Sykes & J. S. Bell, Pergamon Press, 1991.
8. Liboff, Richard L., "Introductory Quantum Mechanics", Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1980.
9. Morrison, Michael A. , "Understanding Quantum Physics-A User's Manual", Prentice Hall Inc., New Jersey, 1990.
10. Peleg, Y. , Pnini, R. , Zaarur, E., "Schaum's outline of Theory and Problems of Quantum Mechanics", McGraw-Hill, 1998.
11. Yung-Kuo Lim, "Problems and Solutions on Quantum Mechanics", World Scientific Publishing, 2000.
12. Zettili, Nouredine , "Quantum Mechanics-Concepts and Applications"(2nd Edition), John Wiley & Sons, Ltd, 2009.

Chỉ mục